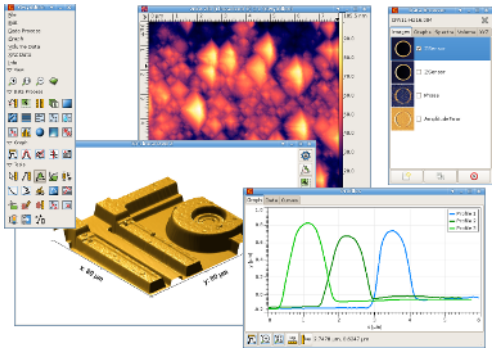
Руководство пользователя Gwyddion

Petr Klapetek, David Nečas, Christopher Anderson

Работа над этим руководством не закончена. Русский перевод: Даниил Браташов.



Copyright © 2004–2007, 2009–2023 Petr Klapetek, David Nečas, Christopher Anderson

Разрешается копировать, распространять и/или модифицировать этот документ на условиях одной из двух лицензий:

- GNU Free Documentation License, версии 1.2 или любой более поздней выпущенной Free Software Foundation; без неизменяемых разделов, без текста на первой и последней страницах обложки. Копия лицензии доступна в разделе GNU Free Documentation License.
- GNU General Public License, версии 2 или любой более поздней выпущенной Free Software Foundation. Копия лицензии доступна в разделе GNU General Public License.

Оглавление

1 Введение 1
1.1 Мотивация . . . 1
1.2 Лицензирование . . . 1

2 Установка 3
2.1 Пакеты Linux/Unix . . . 3
2.2 Сборки для MS Windows . . . 3
Отмена установки . . . 4
Ключи реестра . . . 4
Отсутствующие возможности . . . 4
Включение pygwy . . . 4

3 Приступая к работе 6
3.1 Главное окно . . . 6
3.2 Браузер данных . . . 7
Управление браузером . . . 8
Изображения . . . 9
Графики . . . 9
Спектры . . . 9
Объём . . . 9
XYZ . . . 9
Карты кривых . . . 9
3.3 Управление файлами . . . 9
Загрузка файлов . . . 10
Объединение файлов . . . 11
Сохранение файлов . . . 11
Предыдущие документы . . . 12
3.4 Окно данных . . . 12
3.5 Окно графика . . . 13
3.6 Инструменты . . . 14
3.7 Наложение псевдоцвета . . . 15
Инструмент диапазон псевдоцвета . . . 16
Редактор цветовых градиентов . . . 17
3.8 Презентации и маски . . . 17
Презентации . . . 18
Маски . . . 18
3.9 Выбранные объекты . . . 18
Менеджер выбранного . . . 19
3.10 Окно трёхмерного отображения данных с помощью OpenGL . . . 20
Основные элементы управления . . . 21
Полный набор элементов управления . . . 21
Сохранение изображений . . . 22
Редактор материалов OpenGL . . . 22
3.11 Спектры в точке . . . 23
Инструмент спектроскопии в точке . . . 23
3.12 Объёмные данные . . . 23
3.13 Карты кривых . . . 24
3.14 Данные XYZ . . . 24
3.15 Метаданные . . . 25
3.16 Экспорт изображения . . . 26

Основные . . . 27
Горизонтальный масштаб . . . 28
Значение . . . 29
Выделение . . . 30
Предустановки . . . 31
3.17 Журналирование . . . 31
Отключение журналирования . . . 32
3.18 Импорт неизвестных файлов данных . . . 32
Информация . . . 32
Формат данных . . . 33
Предустановки . . . 34
3.19 Импорт особых данных . . . 34
Графические форматы . . . 34
Стек изображений как объёмные данные . . . 34
Кривые графиков . . . 34
Данные XYZ . . . 35
Данные XYZ Nano Measuring Machine . . . 35
Данные Nanonis SXM . . . 35
3.20 Экспорт текстовых данных . . . 35
Табличные данные . . . 36

4 Обработка и анализ данных 37
4.1 Базовые действия . . . 37
Простейшие геометрические преобразования . . . 37
Перевернуть . . . 37
Поворот на угол, кратный 90° . . . 37
Обрезка . . . 37
Расширение . . . 37
Преобразования с интерполяцией . . . 38
Масштабирование . . . 38
Сделать квадратным . . . 38
Передискретизировать . . . 38
Поворот на произвольный угол . . . 38
Биннинг . . . 38
Преобразования значений . . . 39
Инвертировать значение . . . 39
Ограничить диапазон . . . 39
Переназначить значения . . . 39
Размеры и единицы измерения . . . 39
Уклон . . . 40
Считывание значений . . . 40
Инструмент считать значение . . . 40
Наклоны . . . 40
Инструмент расстояний . . . 41
Профиль вдоль осей . . . 41
Извлечение профиля . . . 42
Радиальные профили . . . 43
Преобразование в другие типы данных . . . 44
4.2 Интерполяция . . . 44
Источники . . . 46
4.3 Выравнивание данных и вычитание фона . . . 46
Выравнивание . . . 46
Исправить нуль и Обнулить среднее значение . . . 46
Выравнивание плоскости . . . 46

Инструмент выравнивания по трём точкам . . . 47
Выравнивание граней . . . 47
Выравнивание поворотом . . . 47
Вычет фона . . . 48
Полиномиальный фон . . . 48
Выровнять основание . . . 48
Вращение дуги . . . 49
Вращение сферы . . . 49
Медианное выравнивание . . . 49
Усечённое среднее . . . 49
Фильтр K-того ранга . . . 50
4.4 Маски . . . 50
Основные операции . . . 50
Инвертировать и удалить маску . . . 50
Извлечь маску . . . 50
Сдвиг . . . 51
Распространить . . . 51
Инструмент редактирования маски . . . 51
Пометить с помощью . . . 52
Морфологическая операция . . . 53
Преобразование в расстояние . . . 53
Утоньшение . . . 54
Зашумление маски . . . 55
4.5 Фильтры . . . 55
Инструмент основные фильтры . . . 55
Фильтр свёртки . . . 56
4.6 Презентации . . . 56
Основные операции . . . 57
Презентация затенения . . . 57
Презентации выделения градиента . . . 57
Презентации поиска края . . . 58
Локальный контраст . . . 59
Ранг . . . 60
Логарифмический масштаб . . . 60
Изображение РЭМ . . . 60
4.7 Артефакты линий сканирования . . . 60
Выравнивание строк . . . 60
Инструмент выравнивания вдоль линии . . . 62
Линейная коррекция ступеней . . . 62
Блочная коррекция ступеней . . . 62
Хороший средний профиль . . . 63
Пометить инвертированные строки . . . 64
Пометить царапины . . . 64
Удалить царапины . . . 64
Удаление шума XY . . . 65
Источники . . . 66
4.8 Локальные дефекты . . . 66
Инструмент удаления пятен . . . 67
Инструмент удаления зёрен . . . 67
Интерполировать данные под маской . . . 67
Обнулить данные под маской . . . 67
Фрактальная коррекция . . . 68
Маска выпадающего . . . 68
Маска несвязного . . . 68

4.9 Общие искажения . . . 68
Компенсировать дрейф . . . 69
Аффинное искажение . . . 69
Искажение перспективы . . . 70
Полиномиальное искривление . . . 71
Выпрямить путь . . . 71
Извлечь выбранный путь . . . 72
Исправить разворот . . . 72
Поле смещения . . . 73
Задать статистику . . . 74
Радиальное сглаживание . . . 74
4.10 Статистический анализ . . . 74
Инструмент статистические величины . . . 74
Основанные на моментах . . . 75
Порядковые . . . 75
Гибридные . . . 75
Прочие . . . 76
Инструмент статистические функции . . . 76
Функции распределения высоты и углов . . . 77
Величины первого порядка против величин второго порядка . . . 77
Функция автокорреляции . . . 77
Функция распределения границы . . . 78
Функция корреляции высота-высота . . . 78
Функция спектральной плотности мощности . . . 79
Функционалы Минковского . . . 80
Распределение диапазонов . . . 81
График функции относительной площади . . . 81
Статистические функции под маской . . . 81
Инструмент статистики строк/столбцов . . . 82
Инструмент длины корреляции . . . 82
Двумерная функция автокорреляции. . . . 83
Двумерная спектральная плотность. . . . 84
Статистики двумерных наклонов . . . 84
Энтропия . . . 85
Ссылки . . . 86
4.11 Одномерные параметры шероховатости . . . 86
Параметры амплитуды шероховатости . . . 86
4.12 Измерение особенностей . . . 88
Кривизна . . . 88
Аппроксимировать форму . . . 89
Анализ граней . . . 89
Измерение граней . . . 91
Решетка . . . 92
Террасы . . . 93
Ссылки . . . 95
4.13 Анализ зёрен . . . 95
По порогу . . . 95
Метод Оцу . . . 95
Пометить по краю . . . 95
Удалить у границы . . . 95
Пометить по водоразделу . . . 96
Сегментация . . . 97
Логистическая регрессия . . . 97
Статистика . . . 98

Сводная информация о зёрнах . . . 98
Статистика . . . 98
Распределения зёрен . . . 98
Корреляция свойств зёрен . . . 99
Инструмент измерения зёрен . . . 99
Свойства зёрен . . . 99
Фильтр зёрен . . . 103
Извлечение номеров зёрен . . . 103
Выравнивание зёрен . . . 103
Источники . . . 103
4.14 Преобразование Фурье . . . 103
Одномерная фильтрация БПФ . . . 105
Двумерная фильтрация БПФ . . . 105
Разделение частот . . . 105
4.15 Вейвлет-преобразование . . . 106
Дискретное вейвлет-преобразование . . . 106
Непрерывное вейвлет-преобразование . . . 108
Источники . . . 109
4.16 Фрактальный анализ . . . 109
Источники . . . 110
4.17 Артефакты взаимодействия с зондом . . . 110
Получение геометрии зонда . . . 111
Моделирование зонда . . . 111
Слепая оценка формы зонда . . . 112
Свёртка с зондом и восстановление поверхности . . . 112
Карта достоверности . . . 113
Источники . . . 114
4.18 Силы и индентирование . . . 114
Анализ отпечатка . . . 114
4.19 Свёртка и деконволюция . . . 114
Свёртка изображений . . . 115
Деконволюция изображения . . . 115
Оценка передаточной функции . . . 116
4.20 Множественные данные . . . 118
Арифметика . . . 118
Профили из нескольких изображений . . . 119
Встроить фрагмент . . . 120
Объединение . . . 121
Сшивание . . . 121
Взаимно кадрировать . . . 122
Взаимосвязь . . . 122
Взаимная корреляция . . . 122
Поиск по корреляции . . . 123
Обработка нейросетью . . . 123
Обучение нейросети . . . 124
Применение нейросети . . . 125
4.21 Магнитно-силовая микроскопия . . . 125
Пересчитать в градиент силы . . . 125
Моделирование поля рассеяния и измерений МСМ. . . . 126
Разрешение зонда и передаточная функция . . . 130
Пример количественного протокола обработки данных МСМ . . . 130
Ссылки . . . 131
4.22 Обработка графиков . . . 131
Базовые операции . . . 131

Перевернуть график . . . 131
Инвертировать график . . . 131
Обрезать график . . . 132
Выравнивание графиков . . . 132
Подровнять . . . 132
Объединение и усреднение графиков . . . 132
Логарифмический масштаб . . . 132
Экспорт графиков кривых . . . 132
Статистика . . . 133
Статистические функции . . . 133
Аппроксимировать функцией . . . 134
Аппроксимировать кривую сила-расстояние . . . 134
Габаритный размер . . . 135
Спектр плотности состояний . . . 135
Найти пики . . . 135
Период/шаг . . . 136
Террасы . . . 137
Источники . . . 138
4.23 Обработка объёмных данных . . . 138
Основные операции . . . 138
Извлечение изображений и профилей . . . 139
Экспорт текстовых данных . . . 139
Характеризовать профили . . . 140
Характеризовать плоскости . . . 140
Арифметика . . . 140
Кластеризация K-средних и K-срединных . . . 141
Магнитно-силовая микроскопия . . . 142
4.24 Обработка объёмных данных: Стеки изображений . . . 142
Выравнивание плоскостей XY . . . 142
Методы суперразрешения . . . 144
Сшивание . . . 144
Источники . . . 145
4.25 Обработка данных XYZ . . . 145
Растеризация . . . 145
Выравнивание . . . 147
Аппроксимировать форму . . . 147
4.26 Обработка данных карт кривых . . . 149
Обрезка . . . 149
Перевернуть . . . 149
Поворот на угол, кратный 90° . . . 149
Размеры и единицы измерения . . . 150
Удалить сегменты . . . 150
Выровнять . . . 150
Извлечь кривые . . . 150
Разделить на сегменты . . . 150
4.27 Карты кривых сила-расстояние . . . 151
Убрать полиномиальный фон . . . 151
Удалить синусоидальный фон . . . 152
Конвертировать кривую FZ в FD . . . 152
Наномеханическая аппроксимация . . . 153
Пример последовательности действий по анализу кривой сила-расстояние . . . 154
4.28 Синтетические поверхности . . . 155
Спектральный . . . 156
Объекты . . . 157

Чвстицы . . . 159
Нагромождение . . . 160
Шум . . . 161
Линейный шум . . . 162
Структура . . . 163
Лестница . . . 165
Решетка . . . 165
Амфитеатр . . . 166
Концентрические круги . . . 166
Звезда Сименса . . . 166
Отверстия (прямоугольные) . . . 167
Колонны . . . 167
Двойная лестница . . . 167
Столбчатые плёнки . . . 168
Баллистическое осаждение . . . 168
Волны . . . 169
Домены . . . 170
Отжиг . . . 171
Связанные уравнения в частных производных . . . 172
Шаблон Тьюринга . . . 172
Диффузия-реакция . . . 173
Диффузия . . . 174
Волокна . . . 175
Решетка . . . 176
Броуновский . . . 177
Фазы . . . 178
Диски . . . 178
Дюны . . . 179
Плато . . . 180
Смачивание . . . 181
Ссылки . . . 181
4.29 Калибровки и погрешности . . . 181
Данные калибровки . . . 181
Получение данных калибровки . . . 182
Применение данных калибровки и дальнейшее использование . . . 182
4.30 Скриптовый интерфейс на Python . . . 183
Расширение и встраивание, модули и модули. . . . 183
Поля данных — как представлены изображения . . . 184
Контейнеры — как представлены файлы . . . 186
Другие типы данных . . . 187
Поиск и перебор данных . . . 187
Выполнение функций модуля . . . 188
Работа с файлами . . . 190
Написание модулей в Python . . . 192
Графический интерфейс пользователя . . . 194
Примечания . . . 196
4.31 Подключаемые модули . . . 197

5 Сводки и таблицы 198
5.1 gwyddion . . . 198
5.2 gwyddion-thumbnailer . . . 200
5.3 Комбинации клавиш . . . 202
5.4 Поддерживаемые форматы файлов . . . 207
5.5 Форматы изображений с большой глубиной цвета . . . 215

5.6 Выражения . . . 216
5.7 Аппроксимирующие функции . . . 218
5.8 Аппроксимация 3D форм . . . 220
Основные общие параметры . . . 220
Общие параметры для выступов . . . 220
Общие параметры для сглаженных выступов . . . 221
Общие параметры для выступов . . . 221
Общие параметры для периодических форм . . . 221
Особые параметры . . . 221
5.9 Ресурсы . . . 222
Градиенты . . . 222
Материалы OpenGL . . . 223
Значения зёрен . . . 223
Предустановки импорта необработанных файлов . . . 226
5.10 Настройки . . . 227
5.11 Настройка панели инструментов . . . 228
5.12 Формат файлов Gwyddion . . . 229
Два слоя . . . 230
Порядок байтов . . . 230
Заголовок файла . . . 230
Данные файла . . . 230
Размещение объекта . . . 230
Компоненты . . . 230
Типы данных . . . 231
GwyContainer верхнего уровня . . . 232
Изображения . . . 232
Графики . . . 234
Спектры . . . 235
Объёмные данные . . . 236
Данные XYZ . . . 237
Данные карты кривых . . . 238
Другие элементы . . . 239
Вспомогательные объекты . . . 240
5.13 Файлы с простым полем (GSF) . . . 240
Общая структура . . . 240
Магическая строка . . . 241
Текстовый заголовок . . . 241
выравнивание с помощью NUL . . . 242
Двоичные данные . . . 242
5.14 Простые файлы XYZ . . . 242
Общая структура . . . 242
Магическая строка . . . 243
Текстовый заголовок . . . 243
выравнивание с помощью NUL . . . 244
Двоичные данные . . . 244

6 Сборка из исходного кода и разработка 245
6.1 Зависимости при сборке . . . 245
6.2 Сборка в среде Linux/Unix . . . 248
Краткие инструкции . . . 248
Распаковка исходного кода . . . 248
Настройка . . . 249
Настройки процесса конфигурирования . . . 250
Настройки пользователей . . . 250

Настройки создателей пакетов . . . 250
Настройки для разработчиков . . . 251
Компиляция . . . 251
Установка . . . 251
Запуск . . . 252
Отмена установки . . . 252
Пакеты RPM . . . 252
6.3 Mac OS X . . . 252
Подготовка . . . 252
MacPorts . . . 253
Fink . . . 253
Запуск . . . 253
6.4 Кросс-компиляция для MS Windows . . . 254
Настройка . . . 254
Основные пакеты MinGW . . . 254
Репозиторий Gwyddion.net . . . 254
Wine . . . 255
NSIS . . . 255
Python . . . 255
Скрипты поддержки . . . 255
Компиляция . . . 256
Запуск под Wine . . . 256
Кросс-компиляция отдельных модулей . . . 256
6.5 Компиляция для MS Windows с использованием MinGW . . . 257
6.6 Компиляция для MS Windows с использованием Microsoft Visual Studio . . . 257
Установка всего необходимого . . . 257
Решение . . . 257
Сгенерированные файлы . . . 257
Python 2.7 . . . 257
Библиотеки . . . 257
'События сборки' . . . 258
Генерация решений . . . 258
Процедура: . . . 258
6.7 Снимок Subversion, Разработка . . . 258
MS Windows . . . 259
6.8 Разработка Gwyddion . . . 260
Руководства по API . . . 260
Сообщения об ошибках . . . 260

7 GNU General Public License (Универсальная общественная лицензия GNU) 261
7.1 Преамбула . . . 261
7.2 Условия воспроизведения, распространения и модификации . . . 262
Раздел 0 . . . 262
Раздел 1 . . . 262
Раздел 2 . . . 262
Раздел 3 . . . 263
Раздел 4 . . . 263
Раздел 5 . . . 264
Раздел 6 . . . 264
Раздел 7 . . . 264
Раздел 8 . . . 264
Раздел 9 . . . 264
Раздел 10 . . . 265
Раздел 11. ОТКАЗ ОТ ГАРАНТИЙ . . . 265

Раздел 12 265
7.3 Как применять эти условия к вашим новым программам 265

8 GNU Free Documentation License 267
8.1 ПРЕАМБУЛА 267
8.2 СФЕРА ДЕЙСТВИЯ, ТЕРМИНЫ И ИХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ 267
8.3 КОПИРОВАНИЕ БЕЗ ВНЕСЕНИЯ ИЗМЕНЕНИЙ 269
8.4 ТИРАЖИРОВАНИЕ 269
8.5 ВНЕСЕНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ 269
8.6 ОБЪЕДИНЕНИЕ ДОКУМЕНТОВ 271
8.7 СБОРНИКИ ДОКУМЕНТОВ 271
8.8 ПОДБОРКА ДОКУМЕНТА И САМОСТОЯТЕЛЬНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ 271
8.9 ПЕРЕВОД 272
8.10 РАСТОРЖЕНИЕ ЛИЦЕНЗИИ 272
8.11 ПЕРЕСМОТР УСЛОВИЙ ЛИЦЕНЗИИ 272
8.12 ПРИЛОЖЕНИЕ: Порядок применения условий настоящей Лицензии к вашей документации . . 272

9 Предметный указатель 274

Глава 1

Введение

Данный текст представляет собой руководство пользователя и справку для программы обработки данных сканирующей зондовой микроскопии Gwyddion.

Последняя версия этого руководства доступна в сети по адресу https://gwyddion.net/documentation/user-guide-ru/. Это руководство доступно на нескольких языках, а именно английском, французском и русском. Все переведенные версии приведены по адресу https://gwyddion.net/documentation/.

Если вы хотите сослаться на Gwyddion в научной публикации пожалуйста используйте следующую ссылку David Nečas, Petr Klapetek, Gwyddion: An open-source software for SPM data analysis, Cent. Eur. J. Phys. 10(1) (2012) 181-188 (вместо или вместе с данным руководством).

1.1 Мотивация

Gwyddion это модульная программа анализа данных СЗМ. В первую очередь она предназначена для анализа полей высот, полученных различными техниками сканирующей зондовой микроскопии (АСМ, МСМ, СТМ, СБОМ), но в общем случае её можно использовать для анализа любых полей высот или (монохромных) изображений, например для анализа данных профилометрии или карт толщины, построенных картирующей спектрофотометрией. Gwyddion является свободным программным обеспечением с открытым исходным кодом, выпущенным под лицензией GNU General Public License (GNU GPL).

Основной идеей при разработке Gwyddion было создать модульную программу для анализа двумерных данных, которую можно легко расширять отдельными модулями без пересборки ядра. Более того, поскольку программа является свободной, это позволяет предоставить исходный код разработчикам и пользователям, что существенно облегчает дальнейшее её улучшение.

Gwyddion в настоящий момент можно использовать в операционных системах семейства Linux/Unix (включая Mac OS X) и Microsoft Windows. Оба семейства операционных систем можно использовать также для разработки. Для создания графического интерфейса пользователя использовались библиотеки Gtk+, поэтому программа может быть легко портирована на любую систему, поддерживаемую Gtk+.

Разработка Gwyddion сейчас поддерживается Чешским институтом метрологии (Czech Metrology Institute). Проект был начат как часть инициативы Nanomet (проходящей по программе Euromet) в августе 2004 года. Предполагается, что большее число людей и организаций могут принять участие в разработке. Проект открыт для каждого. Добро пожаловать...

1.2 Лицензирование

Gwyddion распространяется на условиях лицензии GNU General Public License (GNU GPL). Полный текст лицензии также включается в виде файла COPYING в архиве с исходным кодом (программы установки под MS Windows также содержат её как файл COPYING.wri). Вкратце, эта лицензия сводится к следующему:

- Можно свободно использовать эту программу. Можно свободно делать копии, изменять и распространять их. Можно скачать программу с домашней страницы Gwyddion и изменять её по своему желанию.
- Если вы решите распространять её, изменённый код по прежнему должен распространяться под той же лицензией. В частности, необходимо предоставлять исходный код вместе с программой.
- То же самое касается модулей расширения функций, т.е. если вы написали модуль для импорта нового типа файлов или функцию анализа данных, они должны лицензироваться также под лицензией GNU GPL (если вы их распространяете – при частном использовании вы вольны делать что угодно с ними).
  Тем не менее, можно запускать из Gwyddion программы третьих лиц и они не обязательно должны распространяться под той же лицензией, если они не являются производными работами от Gwyddion (что, следует признать, не всегда легко определить).

Основные причины, по которым программа распространяется под этой лицензией, сводятся к следующему: прежде всего, такая политика лицензирования позволяет нам делать модульную программу, которая легко

может разрабатываться множеством людей из различных организаций. Во вторых, эта лицензия защищает права разработчиков, что их код, распространяемый открыто, не будет скопирован и использован для создания закрытых и ограничивающих пользователя (и самого разработчика) в правах продуктов.

Глава 2

Установка

Исходные коды и двоичные файлы Gwyddion можно загрузить со страницы download сайта проекта или напрямую со страницы загрузки SourceForge.net. Порядок установки слегка меняется в зависимости от используемой операционной системы и различных методов установки, которые описаны в следующих разделах.

Чтобы попробовать Gwyddion в деле вам возможно понадобятся образцы файлов Gwyddion. Они сохранены в родном формате Gwyddion и представляют собой типичные данные ACM.

2.1 Пакеты Linux/Unix

Некоторые из систем GNU/Linux и Unix могут содержать уже собранные пакеты с Gwyddion. Страница загрузки проекта отслеживает известные пакеты и сборки. Например, Debian, Ubuntu, Gentoo, openSuSE или FreeBSD предлагают пакеты Gwyddion. Также существует приложение в формате Flatpak, которое можно устанавливать в различных дистрибутивах. Gwyddion доступен в нескольких репозиториях портов/пакетов для Mac OS X, таких, как MacPorts, Homebrew и Fink. Если ваша операционная система содержит подобные пакеты, и они достаточно свежие, можно установить их стандартными средствами операционной системы. Если нет, возможно вам нужно перейти к разделу о компиляции из исходного кода.

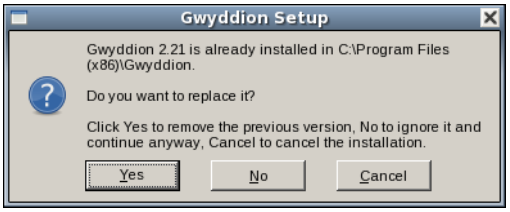
2.2 Сборки для MS Windows

Пакеты для MS Windows, собранные разработчиками, доступны на странице загрузки проекта. В настоящее время доступны версии как для 32-битных, так и для 64-битных систем. Большинству новых пользователей скорее всего нужна 64-битная версия. Однако, 32-битные версии также могут найти своё применение.

Замечание MS Windows будет предупреждать, что программа исходит от неизвестного издателя, небезопасна, не заслуживает доверия или что-то в этом роде (формулировка зависит от версии ОС). Это связано с тем, что для того, чтобы избежать предупреждения, нам пришлось бы регулярно платить сотни евро какой-либо сертификационной компании. Если вы загрузили установщик с SourceForge, это официальный установщик Gwyddion, и нет варианта, которому можно доверять сильнее. Вам просто нужно продолжать, несмотря на попытки MS Windows отговорить вас.

Замечание Формат поставки исполняемых файлов MS Windows был сильно изменён в версии 2.23. Если вы обновляетесь с версии до 2.23 на версию 2.23 или более новую, прочтите описание изменений.

Если Gwyddion уже установлен, программа установки спросит, хотите ли вы заменить предыдущую версию.



Вопрос о том, что делать с предыдущей версией Gwyddion.

Есть три возможных варианта:

Да (заменить) Уже установленная версия будет заменена. Это обычный метод обновления.

Нет (оставить) Уже установленная версия будет проигнорирована и установка пойдёт как новая. В общем случае, это плохая идея, т.к. обе версии будут использовать общие настройки и пути реестра, и если вы удалите одну из них, другая также будет задета. более того, при этом не удаляются никакие файлы из уже имеющейся версии - и они могут мешать работать новой. Хотя в некоторых случаях этот вариант может оказаться полезным.

Отмена Установка будет отменена и старая версия останется нетронутой.

На следующих шагах программа установки напоминает о включенных в состав пакета программных компонентах и их лицензиях (что они все являются свободным программным обеспечением), дают поменять каталог установки и предлагают выбрать язык, используемый для отображения интерфейса пользователя.

Отмена установки

Если вы хотите удалить Gwyddion, перейдите в Пуск → Панель управления → Установка и удаление программ (Пуск → Панель управления → Программы и компоненты в некоторых версиях Windows) и выберите Gwyddion. Этот путь может отличаться в других версиях Windows.

Ключи реестра

Программа установки создаёт следующие нужные ключи в ветке реестра HKEY_LOCAL_MACHINE\Software\Gwyddio

InstallDir Каталог установки, т.е. C:\Program Files\Gwyddion. Чтение этого ключа может быть полезным чтобы определить, куда ставить дополнения.

Version Полная версия Gwyddion как строка.

Locale Язык интерфейса пользователя Gwyddion, выбранный при установке (точнее, задание локали, которое в том числе определяет и язык). Можно изменить его используя regedit чтобы выбрать другой язык как описано ниже.

Список доступных языков и соответствующих значений Locale включает в себя:

Locale	Язык
cs_CZ.UTF-8	Чешский (Чехия)
en_US.UTF-8	Английский (США)
en_GB.UTF-8	Английский (Соединённое королевство)
fr_FR.UTF-8	Французский (Франция)
de_DE.UTF-8	Немецкий (Германия)
it_IT.UTF-8	Итальянский (Италия)
ko_KR.UTF-8	Корейский (Южная Корея)
ru_RU.UTF-8	Русский (Россия)
pt_BR.UTF-8	Португальский (Бразилия)
es_ES.UTF-8	Испанский (Испания)

Отсутствующие возможности

Gwyddion поддерживает большое число опциональных возможностей, которые зависят от наличия сторонних библиотек. Бинарные сборки под MS Windows содержат большую часть из них, но некоторые не включены в настоящее время:

- Импорт файлов Flexible Image Transport System (FITS).
- Поддержка Pygwy в 64битных сборках (оно поддерживается только в 32битных сборках).

Включение pygwy

Интерфейс написания скриптов на Python, pygwy, включен в инсталятор. Однако, необходимо отдельно установить Python и PyGTK2 чтобы заработали скрипты на Python. Это можно сделать как до установки Gwyddion, так и в любое время после. Если отсутствуют Python и PyGTK2, pygwy просто не будет регистрировать себя при запуске Gwyddion.

Пакет установки Python для MS Windows можно загрузить по адресу https://www.python.org/downloads/. Поскольку pygwy требует Python второй версии, установите пакет Python 2.7, который более не поддерживается. Последняя версия python-2.7.16.msi зеркалируется на странице Gwyddion сайта SourceForge на случай, если возникают проблемы найти или скачать её в других местах.

Для PyGTK2 нужны три пакета: PyGTK, PyCairo и PyGObject. Для загрузки этих модулей необходимо перейти по соответствующим ссылкам на странице http://www.pygtk.org/downloads.html чтобы получить пакеты установки для pygobject-2.28.3.win32-py2.7.msi, pycairo-1.8.10.win32-py2.7.msi и pygtk-2.24.0.win32-py2.7.msi или, возможно, более новых версий, если они станут доступны. Также их зеркало доступно на странице Gwyddion на SourceForge в том случае, если с их поиском и загрузкой возникнут проблемы.

Также сообщалось, что можно успешно установить пакет "всё-в-одном" pygtk-all-in-one-2.24.2.win32-py2.7.msi, который содержит всё, что нужно. Однако, использование этого пакета установки означает, что весь Gtk+ будет установлен дважды (в различные места файловой системы). Который из них будет использоваться pygwy трудно сказать, поэтому этот метод не рекомендуется использовать.

Глава 3

Приступая к работе

Этот раздел определяет некоторые основные концепции и термины, такие, как маски и выделенные области, объясняет организацию данных в Gwyddion и описывает интерфейс пользователя.

Описания достаточно подробны и некоторые из тем, затронутых ближе к концу раздела, такие как импорт необработанных данных, могут считаться углублёнными и не предназначенными для ежедневного использования. Таким образом, несмотря на название, не обязательно читать эту главу целиком для того, чтобы начать работать в Gwyddion. Пользовательский интерфейс Gwyddion достаточно интуитивен, и многое можно узнать просто играясь с ним. Разъяснение основных идей и компонентов, приведённое здесь, возможно просто упростит процесс открытия нового.

Также можно получить справку о работе текущей активной функции или окна непосредственно из программы Gwyddion. Нажатие клавиши F1 или кнопки Помощь в большинстве окон должно показать онлайновую версию этого руководства в браузере. Стартовая страница руководства может быть показана выбором меню Информация → Руководство пользователя. Естественно, оно будет работать только если вы подключены к сети и Gwyddion может найти подходящий веб-браузер. Если нужно настроить это поведение, смотрите изменение настроек если вы хотите или вам нужно изменить настройки, например, использовать оффлайновую версию этого руководства.

Подсказка Команда Информация → Совет дня показывает советы по обработке данных и рекомендует полезные возможности, которые вы могли упустить.

3.1 Главное окно

Главное окно, также называемое окном инструментов, является одним из двух окон, которые запускаются при старте Gwyddion (если не заданы файлы, которые нужно открыть), другое — это браузер данных. Закрытие этого окна приводит к выходу из Gwyddion.

Окно инструментов содержит набор меню Gwyddion и несколько строк с кнопками, связанными с обычными функциями и инструментами. В меню функции сгруппированы следующим образом:

Файл объединяет команды, которые используются для загрузки и сохранения файлов. Некоторые из глобальных команд (например, Выход) также расположены здесь. История недавно открытых файлов может просматриваться командой Файл → Последние файлы → Предыдущие документы.

Правка предоставляет команды управления историей редактирования (Отменить, Повторить) и редакторы для различных глобальных ресурсов, таких как градиенты и материалы для представления данных в шкале пседоцвета и трёхмерном виде или цвета по умолчанию, используемого для масок.

Обработка данных автоматически строится из всех модулей обработки данных, расположенных в каталоге module установки Gwyddion (зависит от операционной системы). Это меню вместе с панелью кнопок Инструменты содержит большую часть команд, которые могут понадобиться для анализа данных СЗМ. Подмножество этих функций также доступно на панели кнопок Обработка данных. Эти кнопки служат кнопками быстрого запуска часто используемых функций из одноимённого меню. Все функции, доступные на этой панели, также можно найти и в меню.

График подобен Обработке данных, за исключением того, что состоит из функций для работы с графиками. Обработка графиков включает в себя аппроксимацию функциями, экспорт данных графиков и т.п. Панель кнопок График снова содержит подмножество наиболее часто используемых функций меню График.

Объёмные данные подобно функциям Обработки данных, за исключением того, что содержит функции работы с объёмными данными.

Данные XYZ подобно функциям Обработки данных, за исключением того, что содержит функции работы с данными XYZ.

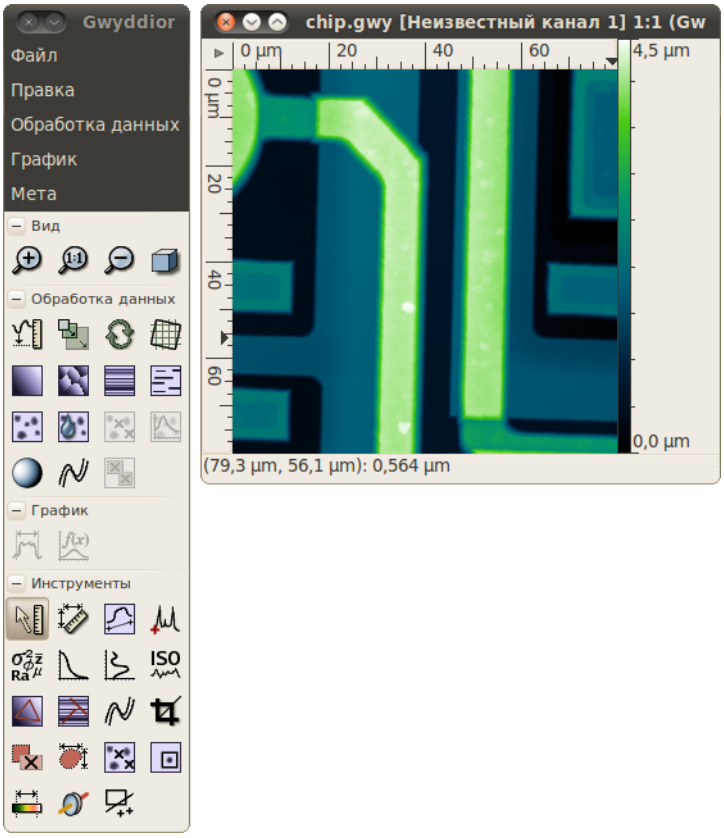
Карты кривых подобно функциям Обработки данных, за исключением того, что содержит функции работы с данными карт кривых.

Информация содержит команды, которые представляют вспомогательную информацию о Gwyddion, такие как версия программы и список загруженных модулей вместе с содержащимися в них функциями. Также там находится команда включения браузера данных.

И, наконец, можно найти в главном окне несколько рядов кнопок. Кнопки в панели Вид предоставляют различные функции масштабирования (которые чаще проще вызвать с помощью комбинации клавиш или просто изменяя размер окна данных) и представления данных в трёхмерном виде. Панели Обработка данных и График содержат избранные функции из меню Обработка данных и График, описанные выше.

Панель Инструменты содержит инструменты, т.е. функции, которые напрямую работают с выбранным в окне данных. Эти функции доступны только с этой панели кнопок.

Группы кнопок в панели инструментов можно менять используя меню Правка → Панель инструментов, вплоть до полного удаления отдельных групп и создания абсолютно новых.



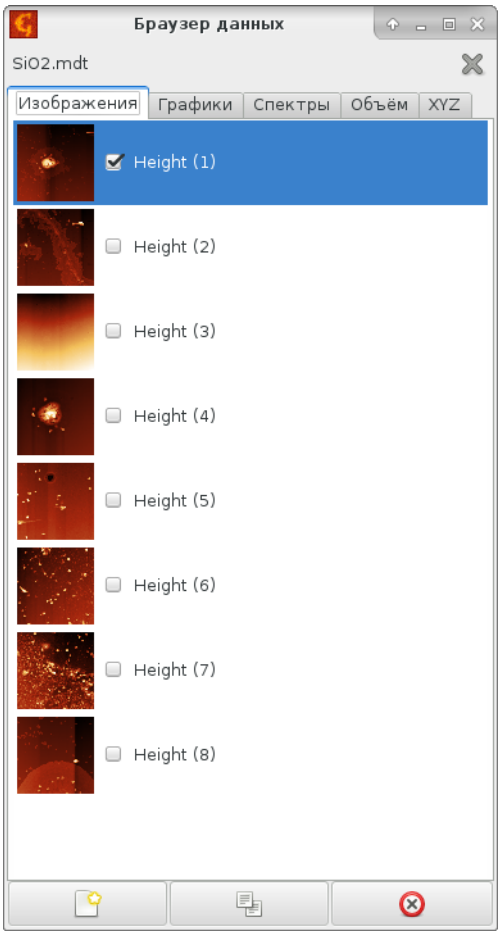
Главное окно и окно данных, показывающее поверхность микросхемы (образец файла Gwyddion chip.gwy).

3.2 Браузер данных

Браузер данных — окно, которое показывает структуру текущего активного файла. Оно показывает содержимое так, как оно представлено внутри Gwyddion, что может в чём-то отличаться от организации данных в оригинальном программном обеспечении.

Gwyddion поддерживает произвольное число двумерных полей данных в файле. В зависимости от контекста в этом руководстве они также называются изображениями или полями высоты (отдельные изображения могут иногда случайно называться каналами, хотя другие, не связанные с изображениями типы данных, состоят также из каналов). Размеры изображений в одном файле могут различаться, физические размеры и значения также могут быть произвольными физическими величинами.

Дополнительно в том же файле могут присутствовать трёхмерные объёмные данные, данные XYZ и одномерные данные, представленные в виде графиков, и данные спектроскопии в точках. Окно просмотра данных предназначено для просмотра и управления всеми доступными данными в файле.



Браузер данных, показывающий несколько изображений.

Управление браузером

Поскольку окно браузера данных всегда показывает структуру текущего активного файла, его содержимое меняется при переходе между разными окнами. которые могут показывать данные различных файлов. Независимо, сохранён ли файл в родном формате Gwyddion (.gwy) или в любом другом, после того, как он загружен, его структура отображается как если бы он хранился в формате Gwyddion.

Окно браузера данных содержит несколько вкладок, по одной на каждый тип данных, который может быть в файле:

- Изображения
- Графики
- Спектры
- Объём
- XYZ
- Карты кривых

. Каждый список показывает имена объектов данных и некоторые дополнительные свойства, которые зависят от типа данных. Имена можно исправлять двойным нажатием по ним.

Отдельные изображения, графики, спектры, объёмные данные, данные XYZ и карты кривых можно удалять, копировать или извлекать в новый файл данных Gwyddion используя кнопки внизу окна браузера данных. Также можно скопировать их в другой файл, перетащив строку из окна браузера данных в любое окно, относящееся к целевому файлу. Чтобы переименовать элемент данных, его нужно выбрать и нажать Enter или три раза кликнуть по нему мышкой.

Кнопка закрытия в правом верхнем углу браузера данных закрывает текущий файл, теряя все несохранённые изменения. Файл также закроется когда все окна, отображающие данные из этого файла, будут закрыты.

Если окно списка каналов закрыто, его можно вызвать используя команду Информация → Показать браузер данных.

Изображения

Браузер данных показывает миниатюры изображений, флажки, управляющие, будет ли виден канал (т.е. будет ли он показан в отдельном окне), и названия изображений. Наличие презентации и/или маски отображается показом следующих символов справа от имени:

- M – маска
- P – презентация
- C – калибровка

Графики

Список графиков показывает флажки видимости и имена графиков. Справа от имени отображается число кривых в графике.

Спектры

Список спектров показывает названия спектров и число точек в наборе. Поскольку данные спектроскопии в точке отображаются и обрабатываются только в связке с двумерными данными используя инструмент спектроскопии, у них нет флажков, управляющих видимостью.

Объём

Список объёмных данных показывает имя данных и число слоёв в направлении оси z, т.е. перпендикулярно сечению, показанному на экране. Буква Z после числа слоёв показывает наличие калибровки оси z.

XYZ

Список данных XYZ показывает название данных и число точек в наборе точек XYZ.

Карты кривых

Список карт кривых показывает название набора данных и количество кривых (серий данных) в каждой точке карты. Если кривые сегментированы, число сегментов показывается после запятой.

3.3 Управление файлами

Gwyddion использует свой собственный формат данных (.gwy) для сохранения данных. Этот формат обладает следующими важными преимуществами:

- Возможность сохранять полное состояние отдельных данных, включая маски, выделенные области и другие свойства.
- Произвольное количество изображений, графиков, спектров, объёмных данных и данных XYZ с произвольными размерами и единицами как для значений независимых переменных, так и для значений сохранённых данных.
- Представление всех данных с двойной точностью, что предотвращает потерю информации в результате округления.

Вследствие этого, мы рекомендуем использовать именно этот формат для сохранения обработанных файлов.

Другие форматы файлов данных обрабатываются соответствующими модулями загрузки и сохранения файлов. Помимо большого числа файловых форматов, используемых в сканирующей зондовой микроскопии, могут также быть импортированы форматы графических файлов (PNG, JPEG, TIFF, TARGA) и сырые двоичные и текстовые данные. Если ваш формат данных СЗМ ещё не поддерживается Gwyddion или загружается некорректно, мы рекомендуем вам или написать модуль импорта (если есть такая возможность), или связаться с разработчиками чтобы помочь им улучшить поддержку.

Список поддерживаемых форматов файлов приведён в разделе Сводки и таблицы.

Загрузка файлов

Файлы открываются с помощью меню Файл → Открыть. Тип файла определяется автоматически, основываясь только на его содержимом. Поскольку одни и те же расширения такие, как .img, .afm или .dat используются многими различными типами файлов СЗМ, этот подход является предпочтительным по сравнению с вариантами, основанными на анализе расширения файлов.

Единственным исключением является импорт различных необработанных данных, как двумерных, так и графиков, которые должны быть выбраны явным образом в диалоге открытия файла. В разделе Импорт файла с необработанными данными описаны более детально импорт необработанных данных и извлечение вручную данных из неподдерживаемых форматов, а в разделе Импорт специфических данных описывается импорт данных XYZ, двоичных изображений и файлов графиков.

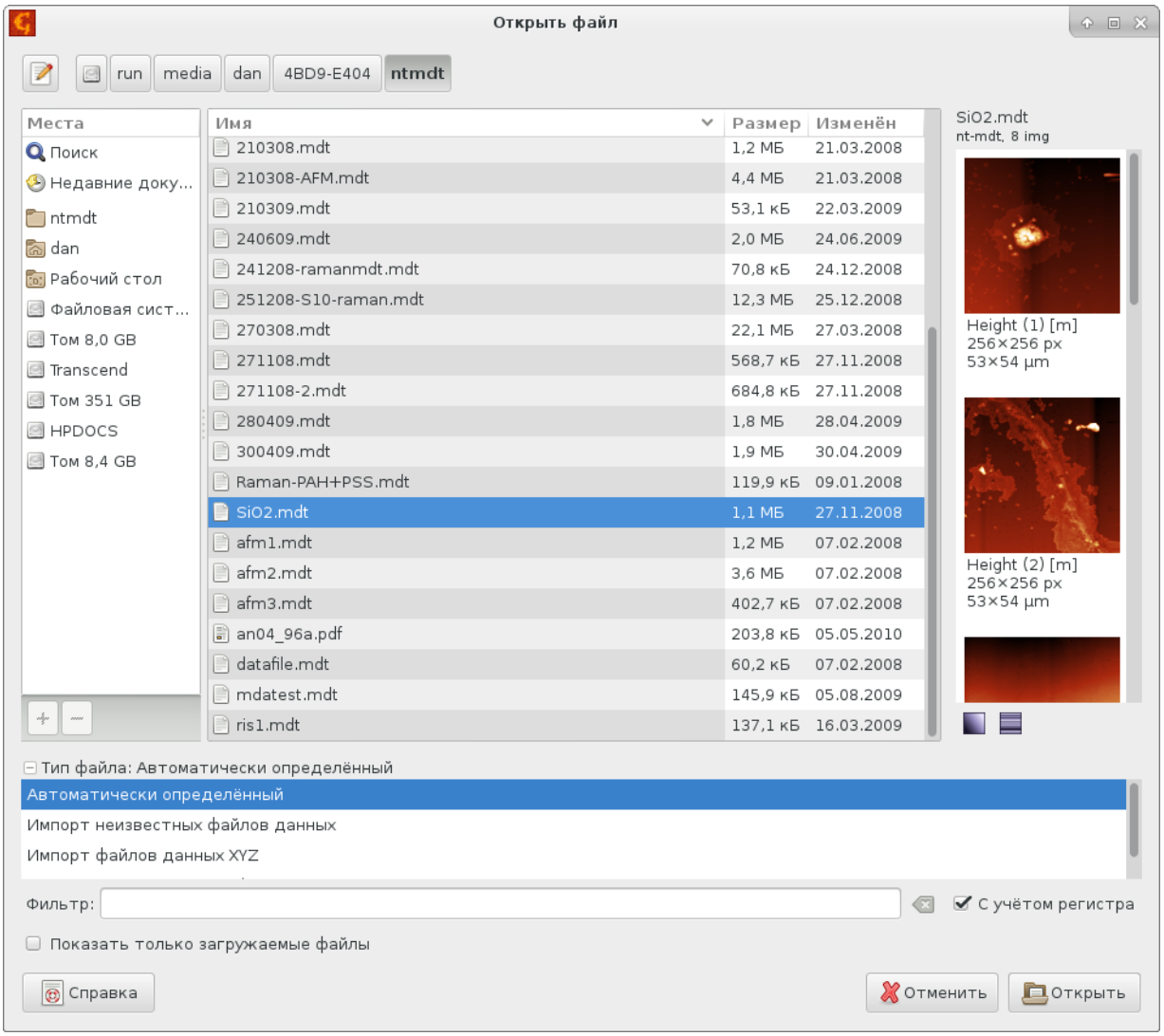
Список файлов в диалоге открытия можно ограничить только теми файлами, которые Gwyddion распознаёт как загружаемые, включением опции Показать только загружаемые файлы. Метка типа файла при этом показывает фильтрацию добавлением (отфильтровано) к концу. Это нередко может оказаться удобным, но с другой стороны может замедлять доступ к каталогам с большим количеством файлов.

Список файлов также можно фильтровать по имени используя опцию Фильтр в нижней части окна. Можно ввести как маску имени файла, например, *.dat, так и часть имени, например, carbo. Нажатие Enter обновляет список после модификации фильтра.

Замечание Фильтры и опции импорта необработанных данных запоминаются. Если открыть диалог выбора файлов спустя некоторое время и часть файлов оказывается отсутствующими или внезапно не загружаемыми, следует проверить настройки фильтра имён и установленный тип файла.

Предварительный просмотр содержимого показан справа (для автоматически загружаемых файлов). Мелким текстом над окном предпросмотра показан тип файла, т.е. название модуля, использованного для загрузки файла, и число изображений (img), графиков (gr), данных спектроскопии в точке (sp), блоков объёмных данных (vol) и данных XYZ (xyz) в файле.

Подсказка Предпросмотр каналов изображений может показывать данные с выровненной базовой плоскостью или с коррекцией строк. Этим можно управлять с помощью небольших кнопок под списком предпросмотра.



Окно открытия файла с раскрытыми вариантами типа файлов и предпросмотром содержимого файла.

Объединение файлов

Объединение файлов, проводимое с помощью меню Файл → Объединить, подобно нормальной загрузке файлов за исключением того, что выбранный файл (или файлы) присоединяется к текущему открытому файлу. Другими словами, изображения, графики и другие типы данных вместе со всеми своими настройками и свойствами добавляются к уже присутствующим в текущем файле.

Сохранение файлов

Большая часть предыдущих параграфов также применима к сохранению файлов. Одним из главных различий является надёжность автоматического определения типа файла. В то время, как при загрузке исследуется содержимое файла, сохранение полагается на имя файла и его расширение. В сочетании с большим числом различных типов файлов, использующих одно и то же расширение такое, как .img, .afm или .dat это приводит к неоднозначностям. Выберите тип файла вручную перед сохранением, если вы не уверены.

Поскольку единственным типом файлов, который может полностью представить структуры данных Gwyddion является его родной формат файла, только сохранение в файл .gwy является правильным. Сохранение в другие форматы по существу представляет собой экспорт ограниченного подмножества данных, обычно только активного изображений (без масок и презентаций). Следовательно, оно не меняет имя текущего файла на имя только что сохранённого.

Файл → Сохранить как... можно также использовать для экспорта данных изображений в изображения. Просто введите имя файла foo.png чтобы экспортировать текущий канал в изображение PNG, то же самое справедливо и для других графических форматов.

Предыдущие документы

История недавно открытых файлов доступна в меню Файл → Последние файлы. Подменю содержит последние десять недавно использованных файлов для быстрого вызова, более подробная история недавно открытых файлов доступна с помощью последнего пункта меню Предыдущие документы.

История документов выводит файлы отсортированными по времени последнего обращения (последние наверху), с предпросмотром и некоторой дополнительной информацией о выбранном канале. Функции нижнего ряда кнопок следующие:

Очистить Удаляет элементы истории для файлов которые были удалены или стали недоступны по другим причинам.

Закрыть Закрывает окно истории документов.

Открыть Открывает выбранный файл. Этого же можно достичь активировав выбранную строку либо двойным щелчком, либо с помощью клавиатуры.

В истории можно искать или фильтровать её по имени с помощью строки «Фильтр» над кнопками. Фильтр активируется нажатием Enter в строке ввода шаблона фильтрации. Чтобы показать все элементы истории, очистите эту стоку и активируйте её. Шаблон поиска интерпретируется двояко:

- Если шаблон содержит символы групповой операции, т.е. * или ?, он интерпретируется как раскрытие имени файла. Это означает, что ? заменяет один любой произвольный символ, * заменяет произвольную последовательность из нуля и более символов, и имя файла должно точно соответствовать шаблону. Следует отметить, что разделители пути (/ или \) не рассматриваются отдельно, следовательно, в шаблоне *.mdt начальная * соответствует всем предыдущим компонентам имени каталога. Синтаксис шаблона описан в документации по GPatternSpec.
- Если шаблон не содержит символов раскрытия, он напрямую ищется как часть имени файла.

Чувствительность поиска к регистру символов, управляемая опцией С учётом регистра, полезна в основном на системах, разделяющих регистр букв в именах файлов, таких как Unix. На системах, не различающих самостоятельно регистр символов, рекомендуется держать эту опцию выключенной.

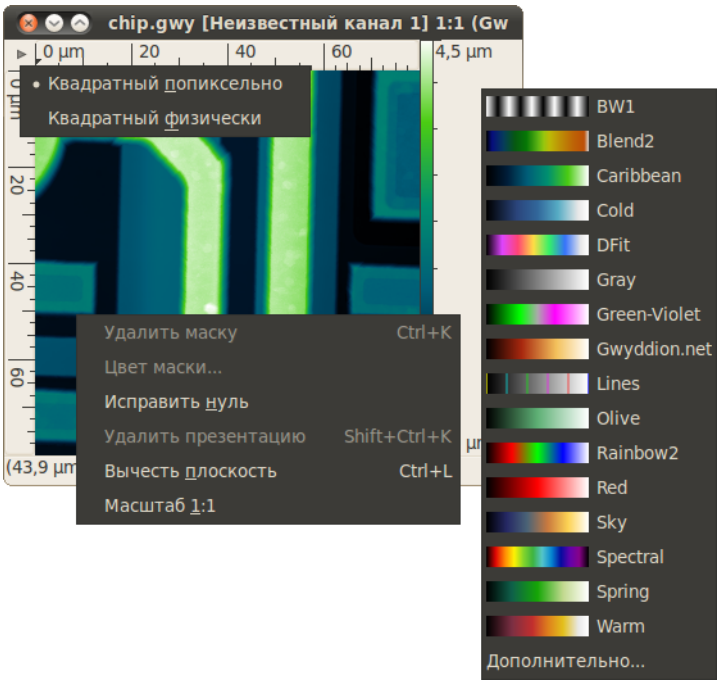
3.4 Окно данных

Двумерные данные отображаются в т.н. окнах данных. Они являются основными интерфейсными элементами для работы в Gwyddion. Данные отображаются как поле псевдоцвета, соответствующего высоте. Ось псевдоцвета, которая показывает соответствие между цветом и реальными значениями высоты, отображается в правой части окна данных.

Палитра псевдоцвета, используемая для отображения данных о высоте, может быть изменена нажатием по оси псевдоцвета с помощью правой кнопки мыши (т.е., вызовом контекстного меню) и выбором палитры из списка. Наиболее часто используемые палитры доступны из контекстного меню; тем не менее гораздо больший набор палитр доступен при использовании пункта меню Дополнительно. Более того, можно использовать редактор цветовых градиентов для создания собственных палитр и выбора палитр, которые будут отображаться в коротком списке.

Контекстное меню доступно также для области данных. Меню состоит из основных операций с данными и презентациями. Чтобы добраться до всех возможных операций нужно использовать меню Обработка данных... в главном окне Gwyddion или некоторые из инструментов, доступных в наборе кнопок Инструменты главного окна Gwyddion.

Стрелка в верхнем левом углу вызывает меню управления соотношением сторон. Данные могут отображаться или с пикселями, соотносящимися 1:1 к точкам экрана (Квадратный попиксельно), или с физическими размерами соотносящимися 1:1 с экраном (Квадратный физически). Например, образец размерами 1×1 μm, отсканированный с уменьшенным разрешением медленной оси и содержащий, таким образом, 512×128 точек, может отображаться или в окне 512×128, или 512×512.

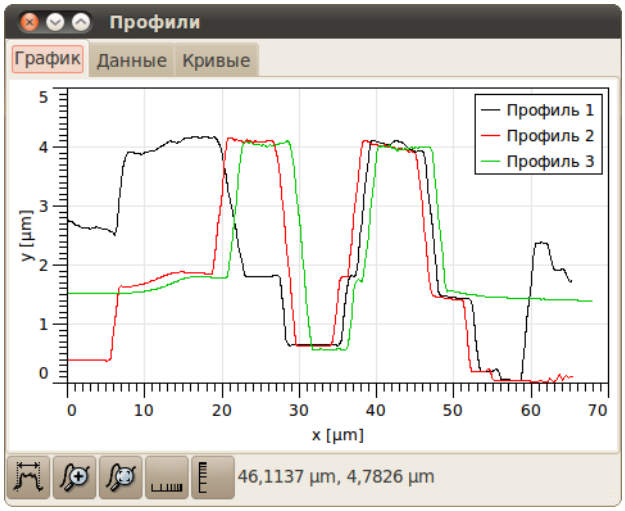


Окно данных с открытыми всеми тремя доступными контекстными меню.

3.5 Окно графика

Окна графиков используются для обработки одномерных данных. Они создаются с помощью соответствующих инструментов и модулей, которые извлекают графики из данных поля высот.

Окно графика состоит из трёх вкладок: первые две представляют графический и табличный вид одномерных данных, третья показывает список кривых графиков. Некоторые из инструментов, связанных с просмотром одномерных данных, доступны непосредственно в панели инструментов окна графика, а именно, кнопки масштабирования и включения логарифмических масштабов осей. Все возможные операции доступны в меню График основного окна Gwyddion или при щелчке правой кнопкой мыши в области отображения графика.



Окно графика с тремя профилями.

Чтобы править вид кривой можно или щёлкнуть мышью по ней на графике, или активировать (двойным щелчком) соответствующую строку в списке кривых. Отдельные кривые можно удалить выбором их на вкладке Кривые и нажатием Delete. Также можно скопировать отдельные кривые на другие графики перетаскивая строчки из списка кривых на них (в том случае, если графики совместимы по единицам измерения на осях).

Щелчок левой кнопкой мыши на оси графика выводит диалоговое окно со свойствами оси. Свойства легенды можно редактировать с помощью двойного щелчка по ней.

3.6 Инструменты

Функции из меню Обработка данных и панели кнопок выполняются или сразу, или после запроса пользователя о параметрах и настройках в диалоговом окне. Инструменты, доступные на панели кнопок Инструменты работают по другому. После выбора, они остаются активными и всегда следуют за текущим окном данных пока пользователь не переключится на другой инструмент. Другими словами, при использовании инструмента можно свободно переключать окна данных и он всегда будет показывать информацию из окна с текущими данными или оперировать с ними. Инструменты также отличаются работой с выделенными областями, т.е. точками, линиями и прямоугольниками на окнах данных. Тем не менее, они выполняют те же задачи, что и функции меню Обработка данных — считывают значения, выравнивают, подсчитывают статистику, корректируют ошибки и т.п.

Инструменты можно запустить только с одноимённой панели кнопок, расположенной в главном окне. Gwyddion включает в себя следующие инструменты:

Считать значение Считывает значения в месте щелчка мыши.

Расстояние Измеряет расстояния. Подобно инструменту чтения значений он позволяет измерить горизонтальное, вертикальное и евклидово расстояние и угол между точками поля данных. В дополнение он показывает разницу значений между точками.

Профили вдоль осей Извлекает горизонтальные и/или вертикальные профили изображения и помещает их в отдельные графики. Эти графики можно дальше обрабатывать командами из меню График.

Профиль Извлекает профили изображения вдоль произвольной линии и помещает их в отдельные графики. Эти графики можно дальше обрабатывать командами из меню График.

Радиальные профили Извлекает радиальные (усреднённые по углу) профили изображения и помещает их в отдельные графики. Эти графики можно дальше обрабатывать командами из меню График.

Спектроскопия Просматривает и извлекает данные спектроскопии в точках.

Статистические величины Рассчитывает основные статистические величины (среднеквадратичное отклонение, Ra, минимум, максимум, площади поверхности и проекции, и т.п.) для выделенных областей и полных полей данных. Также может рассчитывать их только для области под маской или комбинировать эти два способа выбора интересующей области.

Статистические функции Рассчитывает основные статистические функции (распределения высот и наклонов, функцию автокорреляции, функцию спектральной плотности мощности и т.п.) на выделенной области или полном поле данных.

Статистика по столбцам/строкам В некоторой степени дополняя одномерные статистические функции, этот инструмент строит характеристики, такие как среднее, срединное или длина поверхности для каждой строки (столбца).

Длина корреляции Быстрая оценка длины автокорреляции T на основе линий сканирования с использованием нескольких распространенных методов.

Шероховатость Рассчитывает стандартизированные одномерные параметры шероховатости.

Выравнивание по трём точкам Выравнивает данные с помощью плоскости, полученной щелчком мышью по трём точкам в окне данных. Три значения затем могут быть усреднены по небольшой области вокруг выбранной точки.

Выровнять вдоль линии Инструмент выравнивания строк путём выравнивания высот вдоль набора произвольных прямых линий.

Кадрирование Отрезает часть данных.

Редактор маски Редактирование масок вручную: создание, исключение, пересечение, инверсия, нарастание и уменьшение, ...

Измерение зерна Измеряет параметры отдельного зерна.

Удаление зерна Удаляет непрерывные части маски нажатием на точку маски и/или интерполирует (удаляет) данные под непрерывной частью маски.

Удаление пятен Удаляет пятна вручную. После выбора точки в окне данных, пометьте область, которую нужно интерполировать на увеличенном виде и удалите дефект используя выбранный метод интерполяции.

Диапазон цвета Растягивает диапазон цвета или меняет способ отображения шкалы псевдоцвета. Позволяет пользователю изменить диапазон представления псевдоцвета (по умолчанию от минимума до максимума данных).

Фильтр Основные фильтры — среднее, срединное, выборочная уборка шума, минимум. максимум и подобные простые фильтры, уменьшающие шум данных.

Менеджер выбранных объектов Показывает выбранные объекты для канала изображений и копирует их на другие изображения и файлы.

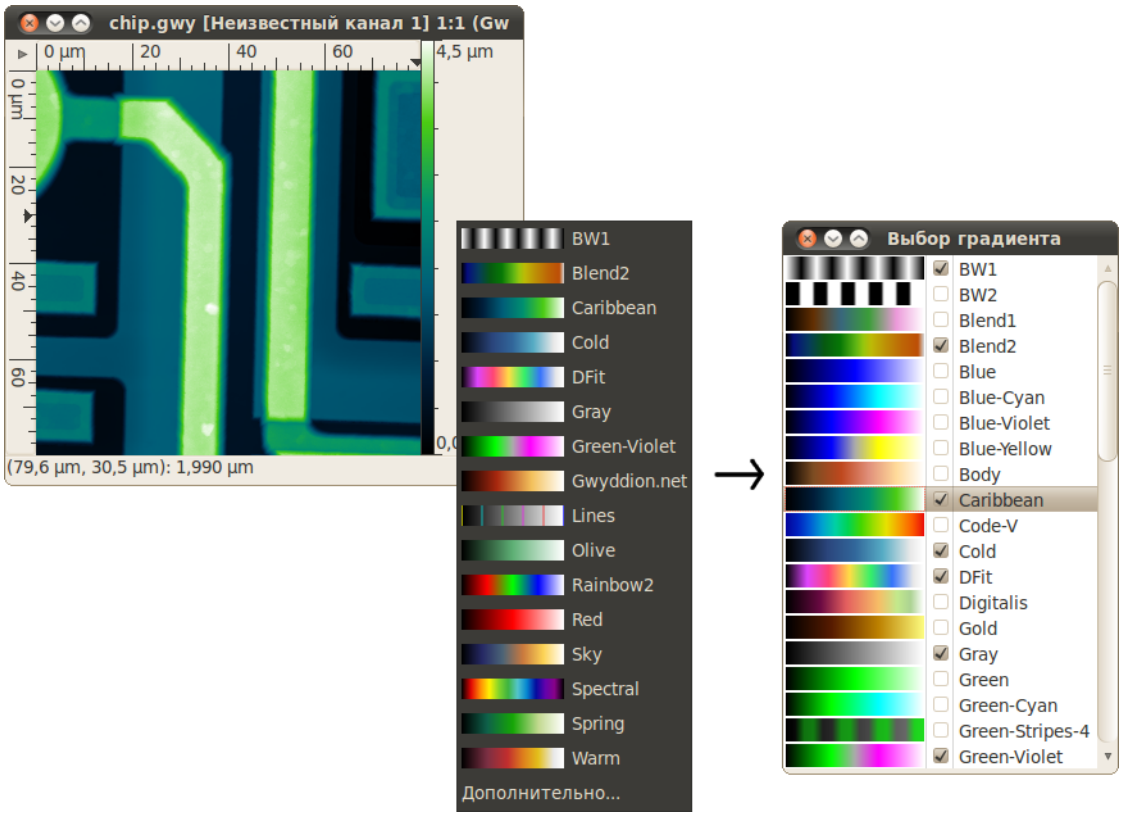
Диалоговые окна инструментов могут быть закрыты (точнее, скрыты, поскольку текущий инструмент остаётся активен даже если его диалоговое окно не показывается) помимо нажатия на кнопку Скрыть нажатием клавиши Esc или повторным нажатием на кнопку инструмента в панели инструментов.

3.7 Наложение псевдоцвета

Наложение псевдоцвета – основной метод визуализации двумерных данных. Используемый цветовой градиент (также называемый палитрой) может быть выбран с помощью щелчка правой кнопкой мыши на ту часть окна данных, где отображается карта псевдоцвета.

Выпадающее меню быстрого выбора предлагает список предпочитаемых градиентов псевдоцвета. Кроме того, оно позволяет вызвать полный список градиентов с помощью пункта меню Дополнительно. Предпочитаемые градиенты могут быть выбраны с помощью флажков в полном списке или в списке редактора градиентов. Выбор строки в полном списке меняет градиент на выбранный, двойной щелчок (или нажатие Enter) также заканчивает выбор и закрывает окно списка. Градиенты с известными именами могут быть быстро выбраны набором начальных букв названия. Градиент по умолчанию (если он не указан в файле) также может быть задан в редакторе градиентов.

Дополнительный контроль над тем, как значения отображаются на шкалу цвета возможен с помощью инструмента Цветовой диапазон



Окно данных с выпадающим по щелчку правой кнопкой мыши меню градиентов и полным списком градиентов псевдоцвета.

Инструмент диапазон псевдоцвета

Инструмент диапазон цвета — специальный инструмент, назначением которого является не анализ или модификация данных, а контроль над тем, как значения данных отображаются на шкалу псевдоцвета. Он предлагает четыре основных способа отображения значений данных на шкалу цвета:

Полный Значения данных линейно масштабируются на шкалу псевдоцвета, полный диапазон значений данных соответствует полному диапазону значений псевдоцвета. Этот тип включен по умолчанию (если вы не меняли настройки по умолчанию).

Фиксированный Значения данных отображаются на значения цвета линейно, заданный пользователем диапазон данных (который может быть как меньше, так и больше полного) отображается на полный диапазон цвета. Данные вне диапазона отображаются цветом его краёв. Диапазон может быть задан несколькими способами:

- вводом нужных значений численно в окне инструмента,
- выбором диапазона на графике распределения высот в окне инструмента,
- выбором области в окне данных, диапазон затем устанавливается по минимальному и максимальному значениям только внутри этой области,
- нажатием кнопок Под маской или Не под маской, которые устанавливают диапазон равным диапазону значений под маской или не под маской соответственно или
- нажатием кнопки Инвертировать шкалу, которая меняет верхний и нижний предел диапазона отображения цвета

Если диапазон не задан вручную, фиксированный диапазон ведёт себя подобно полному.

Следует заметить, что операции обработки данных нередко изменяют диапазон значений — и поскольку фиксированный диапазон остаётся таким, каким он был задан, это может привести, например, к полностью чёрному окну данных. В таком случае можно обновить диапазон вручную или переключиться на другой тип отображения.

Автоматический Значения данных отображаются на цветовой диапазон линейно, эвристически определённый под-интервал полного диапазона данных отображается на полный диапазон цвета. Значения вне этого под-интервала отображаются цветом на границе диапазона.

Адаптивный Полный диапазон данных соответствует полному диапазону цвета, однако, значения данных отображаются на значения цвета нелинейно. Функция отображения основана на инверсной интегральной функции распределения высоты, следовательно плоские области в среднем получают большую часть цветового градиента, и меньшие изменения значения видны на них лучше, чем обычно.

Полоса градиента псевдоцвета с правой стороны от окон данных в этом режиме не отображает никаких значений, кроме минимума и максимума.

Тип отображения может быть установлен для использования по умолчанию с помощью флажка По умолчанию когда он активен. Новые окна данных затем будут использовать этот тип, если в них не будет явно задан другой тип.

Сохранение данных в файл .gwy также сохраняет все настройки отображения псевдоцвета: тип отображения, диапазон и градиент. Градиент, однако, не сохраняется в файл, а только ссылается по имени. Другими словами, одноимённые градиенты являются общими для разных файлов.

Редактор цветовых градиентов

Редактор цветовых градиентов может быть вызван с помощью пункта меню Правка → Цветовые градиенты. Он содержит список градиентов, подобный окну выбора градиента из полного набора, с дополнительной панелью кнопок, и настоящий редактор, который может быть вызван двойным щелчком по градиенту, который нужно изменить, или при нажатии кнопки Редактировать. Также можно переименовать градиент. Для редактирования и удаления доступны только градиенты, созданные пользователем, системные, которые были установлены вместе с Gwyddion, являются неизменяемыми.

Последняя кнопка в панели управления списком градиентов делает текущий выбранный градиент градиентом по умолчанию. Он будет использоваться для всех новых отображаемых данных, для которых не указан определённый градиент.

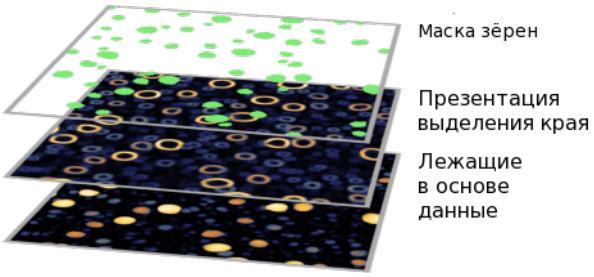
Доступны два режима редактирования:

Точки Цветовой градиент определяется набором точек и заданными в них цветами. Точки представлены треугольными маркерами на градиенте, отображаемом в нижней части окна редактора. Перемещение этих маркеров перемещает точки, новые точки могут быть добавлены щелчком по пустому месту, существующие точки могут быть удалены утаскиванием их с градиента.

Кривая Цветовой градиент определяется кривыми красного, зелёного и синего. Кривые также разделены на сегменты, но эти сегменты для каждой из кривых не обязательно должны совпадать.

3.8 Презентации и маски

Презентации и маски это вторичные изображения с особыми функциями, присоединённые к данным. Презентацией называется другое изображение, отображаемое поверх действительных данных. Маска представляет собой произвольный набор выбранных пикселей. Их наличие показывается флагами P (презентация) и M (маска) в окне браузера данных.



Показ масок и презентаций. Если посмотреть сверху, то можно вообразить, что они сложены как показано на рисунке.

Как маски, так и презентации можно удалить с данных функциями в меню, доступном по нажатию правой кнопки мыши окна данных или с помощью клавиатурных сокращений.

Данные в обычном представлении псевдоцветом (слева), с наложенной маской красного цвета (по центру) и с презентацией затенения (справа).

Презентации

Презентации можно использовать чтобы показать поле высот в другом виде, отличном от показываемой в шкале псевдоцвета карты высот, например, с затенением или с выделенными краями объектов. Также возможно наложить произвольное поле данных на другое в качестве презентации.

Следует отметить, что наложенная презентация действительно является только презентацией, она никогда не используется в расчётах. Во всех инструментах и функциях обработки данных результаты всегда рассчитываются исходя из оригинальных нижележащих данных. Поскольку расчёт презентаций может обладать большой вычислительной сложностью, презентации не обновляются при изменении лежащих в основе данных. Различные доступные презентации описаны в одноимённом разделе.

Поскольку значения изображения презентации имеют произвольную абсолютную шкалу и могут вообще не соответствовать никакой физической величине, шкала псевдоцвета с правой стороны окна данных не показывает ни засечек, ни значений минимума и максимума когда отображается презентация.

Маски

Маски нужны для выделения особых областей, таких как зёрна, дефекты или грани с определённой ориентацией. Маски могут иметь любую форму, вписывающуюся в окно данных, они показываются полупрозрачным цветом, наложенным на данные. Цвет и прозрачность маски можно изменить в контекстном меню окна данных, доступном по щелчку правой кнопкой мыши.

Многие функции, особенно статистические, функции выравнивания и коррекции строк могут использовать маски чтобы выбрать или исключить область для расчёта. Этот выбор представлен в виде опции режим маскирования с вариантами исключить область под маской, включить только область под маской или игнорировать маску и использовать область данных целиком. Следует отметить, что эта опция обычно показывается только при наличии маски.

Поскольку выделение зёрен является наиболее частым использованием масок, некоторые функции для работы с помеченной областью называются функциями «зёрен», например, статистика зёрен. Кроме того, непрерывная часть маски в этом руководстве иногда называется зерном. Однако, поскольку маски не несут никакой информации о способе их создания, все функции для работы с масками могут быть использованы с масками любой природы.

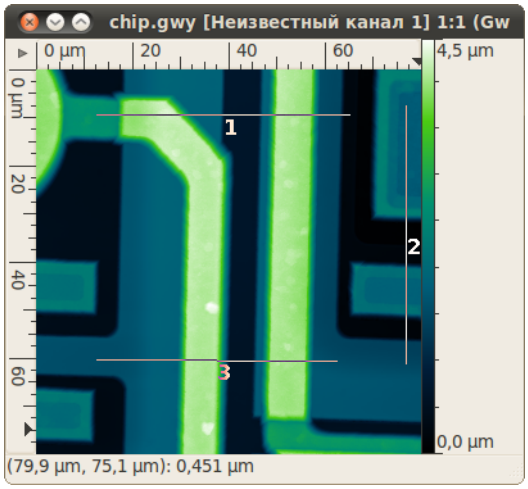
3.9 Выбранные объекты

Все интерактивные инструменты и некоторые из других методов обработки позволяют выбирать на данных мышью геометрические фигуры: точки, линии, прямоугольники, круги/эллипсы. Существующие выбранные объекты могут изменяться подобным образом путём перетаскивания за углы, конечные точки или весь выбранный объект. Когда курсор мыши приближается к редактируемой точке выбранного объекта, он меняет свою форму чтобы показывает возможность изменить эту точку.

Каждый из инструментов обычно использует только один вид выбранного объекта, и, когда он задействован в окне данных, устанавливает режим выбора на этот вид. Выбранные объекты видов, отличных от текущего показанного, запоминаются и вызываются вновь, когда инструмент, который их использует, будет задействован

вновь. Т.е., когда вы выбираете несколько линий с помощью инструмента извлечения профиля, затем переключаетесь на статистические величины (линии пропадают) и выбираете прямоугольную область в которой будут рассчитываться статистические величины, и затем переключаетесь назад на извлечение профилей, прямоугольная область исчезнет, а линии появятся вновь.

Инструменты, которые используют одинаковый режим выбора, например, как статистические функции, так и статистические величины используют прямоугольный режим выделения, делят его между собой. Чтобы посчитать распределение высот того же самого прямоугольника, что вы выбрали для расчёта статистических величин, достаточно поменять инструмент.



Окно данных с тремя выбранными линиями, двумя горизонтальными и одной вертикальной.

Если вы сохраняете данные в родной для Gwyddion формат файла (.gwy), все выбранные объекты будут сохранены вместе с данными и вызваны в следующий раз, когда файл будет открыт и подходящий инструмент выбран.

Нажатие Shift при выделении ограничивает степени свободы фигуры, делая проще рисование фигур из определённого подмножества. Точнее, нажатие Shift ограничивает

- прямоугольные выбранные области до правильных квадратов,
- эллиптические выбранные области до правильных кругов, и
- направления выбранных линий до кратных 15°.

Последняя измененная фигура также может быть подправлена с использованием клавиатуры:

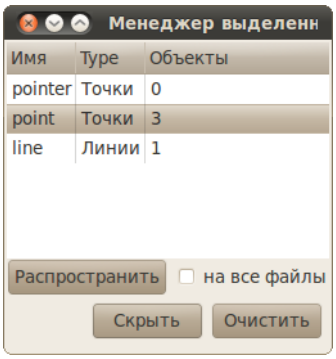
- клавиши со стрелками Влево, Вправо, Вверх и Вниз перемещают точку, для линий и прямоугольников это означает первую точку,
- удержание Shift перемещает вместо этого другую точку для линий или прямоугольников, и
- удержание другого модификатора, например, Alt или Ctrl перемещает точки с большим шагом.

Несколько инструментов могут сохранять выделенные объекты при переключении между изображениями. Это означает, что выделение копируется между текущим изображением и тем изображением, на которое переключается пользователь. Такое поведение можно включить путём выбора опции Сохранить выделение в окне инструмента. В зависимости от дополнительных настроек, текущее выделение может быть скопировано только для изображений, на которых ничего не выделено или заменять существующие выделения.

Менеджер выбранного

Менеджер выбранного — специальный инструмент, который показывает список всех выбранных элементов для изображения и позволяет скопировать их на другие изображения.

Для каждого выбранного объекта показывается имя, под которым он идентифицируется в файле .gwy, тип выбранного объекта и количество выбранных объектов (точек, линий, прямоугольников, . . .). Обычно существует по крайней мере один выбранный объект любого типа поскольку они являются общими для инструментов, как описано выше. Тем не менее, иногда присутствуют специальные или индивидуальные выбранные объекты, как показано на следующем рисунке, демонстрирующем два выбранных набора точек.



Менеджер выбранного показывает несколько выбранных объектов на данных.

Выбранный в списке объект показывается в окне данных.

Можно удалить отдельные выбранные объекты выбрав их в списке и нажав клавишу Delete или кнопку Delete– это эквивалентно очистке выбранного в соответствующем инструменте. Кнопка Очистить удаляет все выбранные объекты.

Однако, наиболее интересным инструментом в менеджере выбранного является копирование выбранных объектов. Есть два варианта как скопировать выбранный объект на другое изображение:

- Перетаскиванием строки из списка выбранных объектов на окно данных копирует объект в это окно.
- Нажатие на кнопку Распространить копирует выбранный объект на все изображения файла. Или, если на все файлы включено, на все изображения всех открытых файлов.

Выбранные объекты копируются только на изображения с совместимыми пространственными единицами измерения. Это означает, что выбранный объект на обычном изображении с метрами в качестве пространственных единиц измерения не будет распространяться на изображение с двумерной функцией спектральной плотности мощности или двумерным распределением наклонов.

Если пространственного разрешения данных приёмника не хватает, чтобы поместить все объекты скопированной выделенной области, тогда копируются только те объекты, что поместились (может так получиться, что ничего не скопируется).

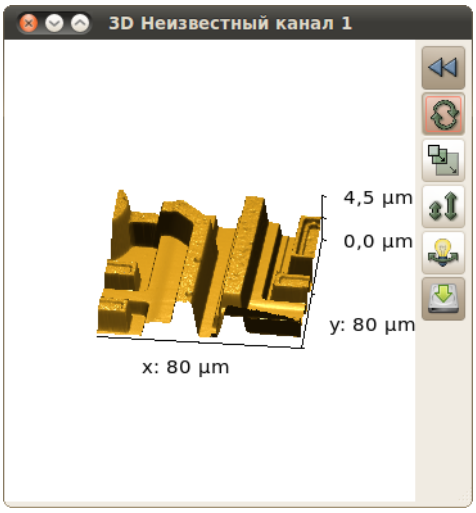
Координаты, определяющие выбранную выбранный объект, можно экспортировать в буфер обмена или текстовый файл используя кнопки Копировать и Экспорт. Каждый особый тип выбранного объекта задаётся своими координатами как описано в документации для разработчиков: например, у точек будет пара координат x и y, в то время, как у прямоугольников будет четыре, которые будут соответствовать координатам x и y его двух углов. Координаты всегда отсчитываются относительно верхнего левого угла изображения, даже если начало координат с ним не совпадает.

3.10 Окно трёхмерного отображения данных с помощью OpenGL

Трёхмерное отображение OpenGL для текущего окна данных можно вызвать кнопкой с изображением куба в ряду кнопок Вид главного окна.

Эта возможность является опциональной, т.е. она может быть отключена во время сборки. Также возможен вариант, когда Gwyddion может отображать трёхмерные данные, а ваша система это не поддерживает. В обоих случаях попытка вызвать трёхмерный вид приводит к появлению сообщения об ошибке, объясняющему, какой из этих двух вариантов случился. В первом случае вам нужно попросить тех, кто собирает исполняемые файлы Gwyddion, собрать его с поддержкой трёхмерного отображения или собрать программу самому из исходного кода. Во втором случае, необходимо обратиться к руководству по вашей операционной системе и посмотреть там как включить поддержку трехмерных функций OpenGL. Если заметны проблемы с быстродействием окна трёхмерного просмотра в MS Windows, то можно попробовать отключить эффекты рабочего стола для Gwyddion (на вкладке Compatibility или Совместимость ярлыка программы).

Окно трёхмерного вида может существовать в двух вариантах: с основными и с расширенными элементами управления. Оно запускается только с основными элементами управления, этот вариант показан на следующем рисунке. Можно переключить окно к расширенному виду (и обратно) с помощью кнопки расширения в верхнем правом углу. Нажатие на область трёхмерного изображения с помощью правой кнопки мыши вызывает окно быстрого выбора градиента псевдоцвета/материала OpenGL.



Окно трёхмерного просмотра данных с помощью OpenGL с основными элементами управления.

Основные элементы управления

Основное окно трёхмерного просмотра содержит справа элементы интерактивного управления. По умолчанию перетаскивание вида мышью вращает его по горизонтали и вертикали. Все возможные режимы перечислены ниже вместе с горячими клавишами, которые переключают между ними:

Поворот (R) Включено по умолчанию при первом показе окна трёхмерного просмотра. При перетягивании вида горизонтально вращает его вокруг оси z, перетягивание по вертикали вращает вид вокруг горизонтальной оси, параллельной плоскости проецирования.

Масштабирование (S) Перетаскивание вида вверх увеличивает его; перетаскивание вниз уменьшает. Размер также можно настраивать колёсиком мыши.

Масштаб значений (V) Перетаскивание вида вверх увеличивает шкалу z, делая выступы и впадины более явными, перетаскивание вниз уменьшает. Шкала значений также может настраиваться колёсиком мыши при зажатой клавише Shift.

Поворот источника света (L) Этот элемент управления будет доступен если в режиме визуализации есть источник света, т.е. в режиме освещения и наложения другого канала (оверлея). Перетаскивание вида мышью меняет положение источника света подобно повороту в нормальном режиме поворота. Горизонтальное перемещение меняет угол φ (направление в горизонтальной плоскости, азимут). Вертикальное перемещение меняет угол ϑ между направлением света и горизонтальной плоскостью. Положение источника света показывается используя «колесо» вокруг поверхности.

Основные элементы управления также включают в себя кнопку экспорта изображения.

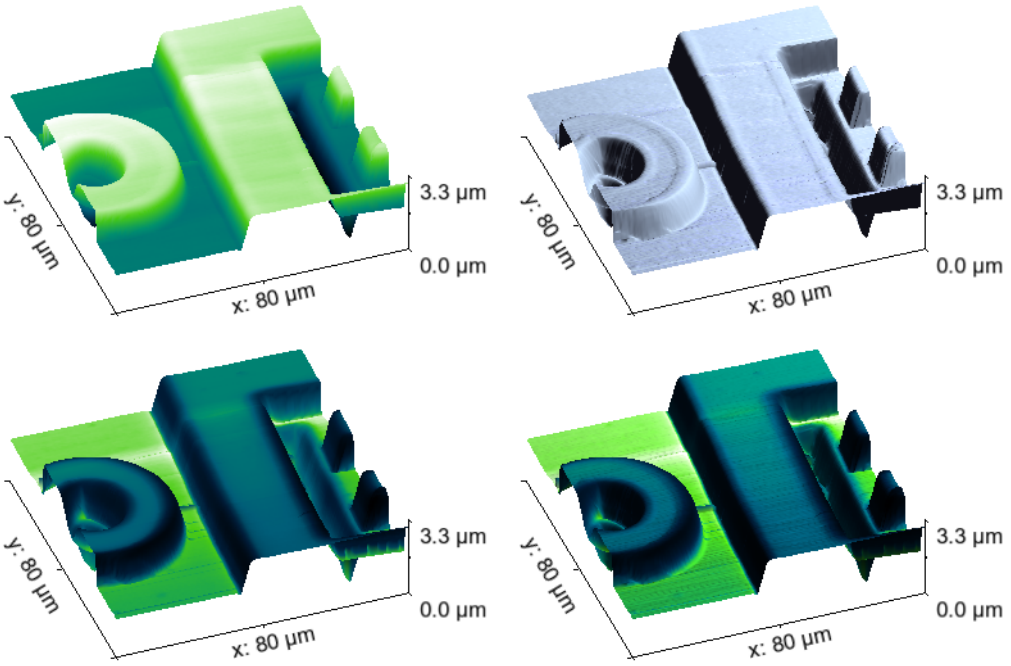
Полный набор элементов управления

В режиме расширенных элементов управления кнопки расположены в верхнем ряду, однако их функции не меняются. В дополнение под ними появляются несколько вкладок с настройками:

Окно трёхмерного просмотра в Gwyddion поддерживает несколько режимов визуализации, которые можно выбрать на вкладке Свет и материал, которая сочетает два основных метода:

- Представление значений данных шкалой псевдоцвета, как в обычном просмотре изображений.
- Отрисовывая освещение поверхности источником света (задаваемым элементами управления светом).

Режимы Градиент и Наложение - без света не используют освещение. Единственное различие между ними в том, что в режиме простого градиента цвет всегда соответствует высотам; в режиме наложения для отображения высоты и цвета можно использовать различные изображения. В режиме Освещение отрисовывается освещение поверхности с использованием выбранного материала. И наконец, Наложение сочетает окраску и освещение. В этом режиме снова высота и цвет могут задаваться различными изображениями.



Режимы визуализации трёхмерного вида. Верхний ряд: простой градиент и освещение. Нижний ряд: оверлеи с другим каналом, используемым для раскраски (слева без освещения, справа с освещением).

Сохранение изображений

Трёхмерный вид может быть сохранён в растровое изображение с помощью кнопки Сохранить. Изображение будет иметь точно такой же размер и содержание, как показано на экране, за исключением возможно удаления пустых полей, если включена опция Обрезать автоматически на вкладке Основные.

Форматом по умолчанию является PNG (Portable Network Graphics). Меняя расширение имени файла на .jpg, .jpeg, .tif или .tiff можно сменить формат изображения на JPEG или TIFF. Если ввести нераспознаваемое расширение, изображение будет сохранено в формате PNG, хотя и с неправильным расширением.

Следует отметить, что из-за особенностей некоторых операционных систем, графических драйверов и оконных сред, на экспортированном изображении иногда могут появляться артефакты в тех областях окна трёхмерного просмотра, которые были скрыты. если вы столкнулись с подобными проблемами, убедитесь, что окно трёхмерного просмотра не скрыто под другими окнами во время экспорта изображения.

Редактор материалов OpenGL

Редактор материалов OpenGL можно вызвать с помощью пункта меню Правка → Материалы OpenGL. Элементы управления в списке материалов будут такими же, как в списке редактора градиентов псевдоцвета, управление материалами также происходит похожим образом. Однако используемый редактор, естественно, отличается. Он позволяет редактировать четыре основных свойства, которые задают материал:

- фоновый цвет $k_{\mathrm{a},\alpha}$ (где $\alpha = \mathrm{red}, \mathrm{green}, \mathrm{blue}$), управляющий отражением фонового освещения, которое считается приходящим равномерно со всех возможных направлений,
- диффузный цвет $k_{\mathrm{d},\alpha}$, описывающий диффузное отражение света, которое не зависит от направления падающего света и чья кажущаяся яркость не зависит от угла наблюдения,
- зеркальный цвет $k_{\mathrm{s},\alpha}$, управляющий зеркальным отражением, где интенсивность отраженного света зависит от угла между направлением на наблюдателя и направлением луча света, который бы отразился идеальным зеркалом с тем же направлением нормали, и
- блеск s, численный показатель, определяющий насколько зеркальное отражение похоже на идеальное зеркало, меньшие значения соответствуют более шероховатым поверхностям, большие – более гладким.

Если мы обозначим $\mathbf{L}$ обычный вектор, указывающий из точки плоскости наблюдения на источник света, $\mathbf{V}$ вектор к наблюдателю, $\mathbf{N}$ вектор нормали к поверхности и $\mathbf{R}$ вектор в направлении отражения идеальным зеркалом, наблюдаемая интенсивность света в модели освещения OpenGL может быть выражена как

$$I_\alpha = k_{a,\alpha} I_{a,\alpha} + k_{d,\alpha} I_{d,\alpha} (\mathbf{N} \cdot \mathbf{L}) + k_{s,\alpha} I_{s,\alpha} (\mathbf{R} \cdot \mathbf{V})^s$$

где $I_{a,\alpha}$, $I_{d,\alpha}$ и $I_{s,\alpha}$ - интенсивности окружающего, рассеянного и зеркального источников света, соответственно.

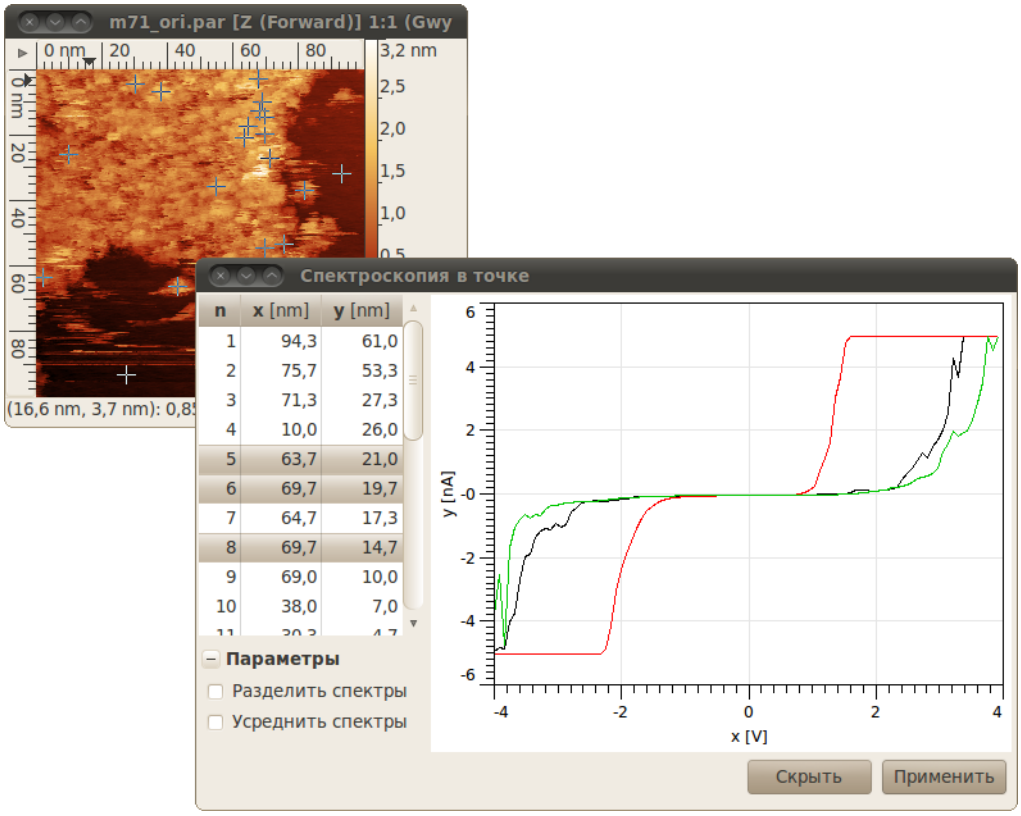
3.11 Спектры в точке

Gwyddion сейчас предлагает некоторые основные способы отображения и извлечения данных спектроскопии в точках (здесь мы будем считать любые кривые, измеренные или иным путём привязанные к отдельным точкам образца, как «спектры»). Если импорт спектров поддерживается для этого типа файлов, они появятся на вкладке Спектры окна просмотра данных. Отдельные файлы спектров могут быть добавлены к двумерным данным с помощью объединения файлов.

Инструмент спектроскопии в точке

Основным инструментом отображения и извлечения является инструмент спектроскопии в точке. Он показывает список точек измерения спектров и их местоположение в окне данных. Отдельные кривые можно выбрать как в этом списке, так и щелчком по соответствующим крестам в окне данных. Если файл содержит более одного набора спектров, можно выбрать среди них нужный на вкладке Спектры окна просмотра данных.

Кнопка Применить извлекает выбранный набор кривых в график, который дальше можно анализировать функциями работы с графиками, такими как аппроксимация кривой сила-расстояние.



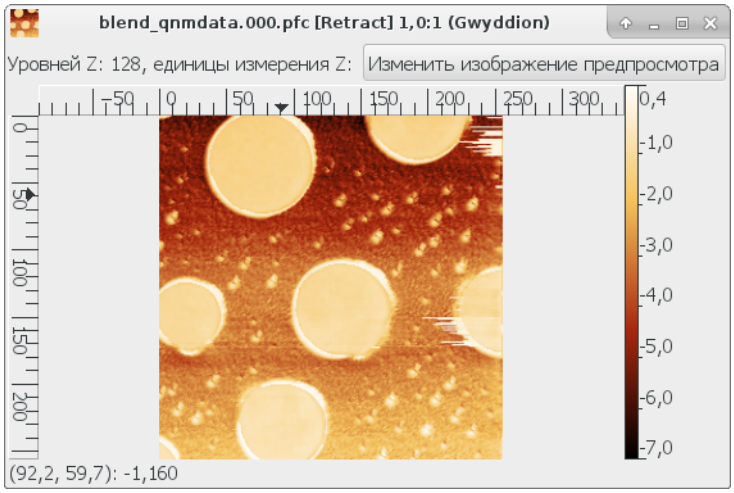
Окно данных с показанными точками измерения и инструмент спектроскопии в точке, показывающий кривые из трёх выбранных точек.

3.12 Объёмные данные

Объёмные данные представляют из себя трёхмерный массив, представляющий из себя, например, данные спектроскопии снятые на правильной сетке (полный спектр в каждой точке изображения) или изменение изображения с течением времени. Следовательно, в зависимости от точки зрения, они могут быть представлены либо как стопка изображений одинакового размера, либо как набор кривых, формирующих правильную сетку (изображение). Это отличает объёмные данные от карт кривых, в которых каждая кривая является различной и они не могут быть представлены в виде стека изображений.

Gwyddion в настоящее время содержит некоторые основные инструменты визуализации и извлечения данных в меню Объёмные данные. Окна объёмных данных, как показано на следующем рисунке, предлагают наиболее

простую визуализацию объёмных данных: изображение «предпросмотра», представляющее одну из плоскостей объёмных данных или другой связанный массив двумерных данных. Координаты изображения x и y соответствуют координатам x и y объёмных данных, ось координат z можно представить ортогональной экрану.



Окно объёмных данных демонстрирует соответствующее связанное двумерное изображение предпросмотра.

Кнопка Изменить изображение предпросмотра в верхней части окна может быть использована для изменения изображения предпросмотра. Изображение предпросмотра может быть либо рассчитано как некая суммарная величина, характеризующая данные вдоль невидимой оси z (минимум, максимум, среднее, ...), либо выбрано как сечение объёмных данных в какой-то точке на оси z, либо можно присоединить любое другое изображение правильного размера для отображения в качестве предпросмотра. OD

3.13 Карты кривых

Карты кривых это наборы кривых измеренные в точках на правильной сетке. В то время, как сетка является правильной, как в данных изображений и объёмных данных, кривые в каждом наборе могут иметь различное количество точек. Некоторые наборы могут быть даже пустыми (данные не измерялись в соответствующей точке). Карты кривых обычно также объединяют несколько наборов данных вместе, например, высоту и силу, в то время как в других типах данных каждая физическая величина представлена отдельным элементом данных.

То, что они содержат набор кривых в каждой точке означает также, что независимая переменная будет одной из кривых. Например, набор кривых сила-расстояние содержит значения силы и значения расстояний. В большинстве модулей, использующих карты кривых, необходимо выбрать какая из переменных будет зависимой и какая независимой (иногда модуль может угадать это самостоятельно).

Важной идеей также является сегментация наборов кривых. В некоторых случаях может быть полезно иметь некоторую разметку в данном наборе, например, чтобы разделить части кривой сила-расстояние, соответствующие подводу к образцу и отводу зонда. Такие отметки формируют сегменты, которые затем могут использоваться модулями обработки данных. Сегменты являются индивидуальными для набора кривых, следовательно каждый набор может использовать только один набор отметок. Сегменты могут загружаться из формата файла производителя прибора или создаваться внутри Gwyddion.

Кнопка Изменить изображение предпросмотра вблизи верха окна может использоваться для изменения изображения предпросмотра. Изображение предпросмотра может либо рассчитываться как некоторая интегральная характеристика кривой, характеризующая данные вдоль невидимого направления z (минимум, максимум, среднее, ...) или, как вариант, любой набор двумерных данных такого же размера может быть показан как изображение предпросмотра.

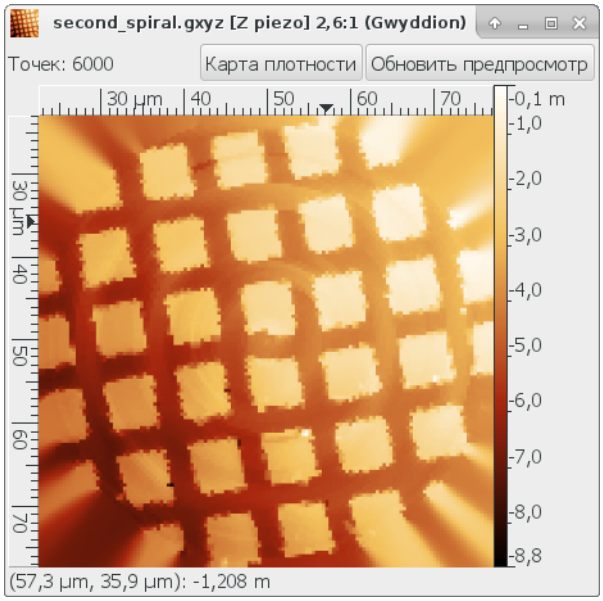
3.14 Данные XYZ

Данные XYZ представляют собой облака точек, которые соответствуют измерениям в произвольном наборе точек, лежащих в плоскости xy. В контексте СЗМ обычно считается, что данные задают функцию поверхности, т.е. одной точке в плоскости xy соответствует одно значение z, по крайней мере концептуально. В более общем

случае данные XYZ могут задавать произвольные трёхмерные объекты. Однако, это не является типичным для СЗМ и в Gwyddion в данный момент считается, что данные соответствуют однозначной поверхности.

Важным следствием из этого является то, что наборы данных XYZ которые различаются значениями z, но определены на одинаковых наборах точек в плоскости xy считаются в Gwyddion «совместимыми». Многие операции определены более просто для совместимых данных или имеют смысл исключительно для них.

Опции обработки данных XYZ, которые находятся в меню Данные XYZ в данный момент ограничены. Окна данных XYZ, как показано на следующем рисунке, обеспечивают простейшую визуализацию данных XYZ: растровое изображение предпросмотра. Это изображение предпросмотра рассчитывается используя быстрый метод и даёт результат похожий на интерполяцию данных XYZ методом ближайших соседей. Изменение размеров окна изменяет размер только для уже рассчитанного изображения предпросмотра. Чтобы рассчитать изображение предпросмотра для текущего размера окна воспользуйтесь кнопкой Обновить предпросмотр.



Окно данных XYZ показывает изображение предпросмотра для сканирования вдоль спирального пути.

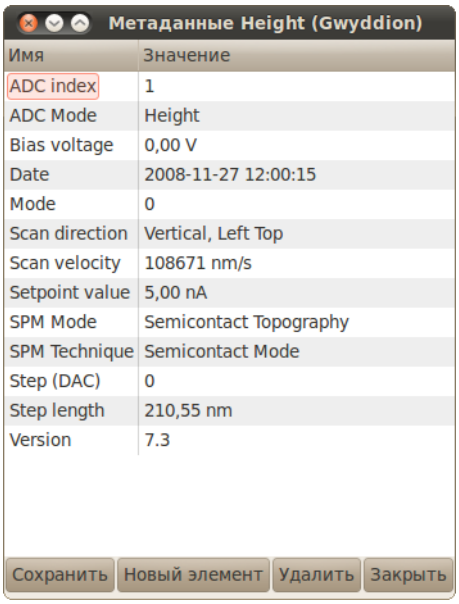
Также возможно переключиться между режимом предпросмотра данных и показа плотности точек XYZ используя переключатель Карта плотности. При изменении размеров окна эта функция ведет себя подобно предыдущей.

3.15 Метаданные

Вспомогательная информация и значения, описывающие определённые данные и условия, при которых они были получены, в Gwyddion называются метаданными. Они могут включать в себя режим работы СЗМ, приложенное к зонду напряжение, частоту сканирования, дату и время измерений или комментарии пользователя.

Метаданные всегда привязаны к определённому каналу. Метаданные для текущего изображения, объёмных данных или данных XYZ можно просмотреть с помощью команды Просмотр метаданных (начиная с версии 2.32) или используя меню Мета → Просмотр метаданных в более старых версиях. Окно просмотра показывает все доступные метаданные как пары имя-значение. Также там можно изменить или удалить значения или добавить новые. Можно экспортировать метаданные канала в текстовый файл с помощью кнопки Экспорт.

Уровень поддержки метаданных различен для различных форматов файлов данных. Для форматов файлов, которые хорошо документированы и/или позволяют импортировать всю метаинформацию в общем виде, обычно доступно большое количество вспомогательных данных, включая скрытые настройки оборудования. С другой стороны возможно, что из ваших файлов не импортируются метаданные, например, если они не содержат вспомогательных данных или неизвестно как их прочесть.



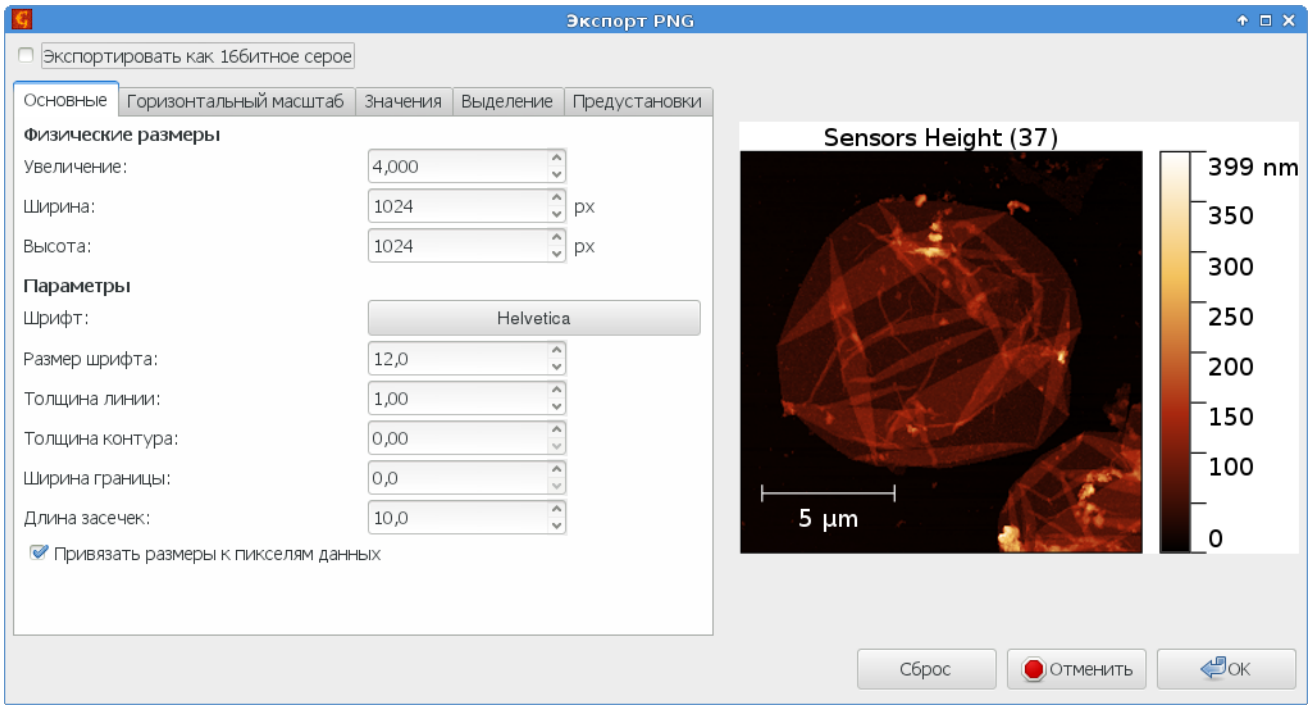
Просмотр метаданных показывает метаданные файла ntmdt.

3.16 Экспорт изображения

Данные микроскопии нередко требуется представить в виде изображения, обычно это нужно для их презентации, иногда для того, чтобы открыть их в программе, которая не поддерживает ни одного из форматов данных СЗМ. Оба варианта реализуются в Gwyddion одинаково: выбором пункта меню Файл → Сохранить как и заданием имени файла, соответствующему формату изображения, например, channel.png или channel.tiff. Раздел справочного руководства Форматы изображений с большой глубиной цвета описывает экспорт данных как изображений в оттенках серого с большой глубиной цвета, которые ещё можно использовать как количественные данные. Для поддерживаемых форматов эту опцию можно включить переключателем Экспортировать как 16битное серое в верхней части диалогового окна экспорта изображений. Остальная часть этого раздела описывает создание красивых изображений для публикаций и презентаций.

Gwyddion может отрисовывать изображения в несколько различных форматов, включая, например, PNG, PDF, SVG, EPS, TIFF, WebP, BMP, PPM, TARGA и JPEG. В зависимости от того, чего хочется достичь, некоторые из них подходят лучше других. В общем случае могут быть рекомендованы следующие настройки:

- PDF (Portable Document Format) для отрисовки высокого качества, подходящей для печати, где все надписи и линии будут идеально контрастными и резкими при любом масштабе. Gwyddion также поддерживает вывод в EPS (Encapsulated PostScript) для тех же целей, однако, некоторые вещи работают несколько лучше при экспорте в PDF.
- PNG (Portable Network Graphics) для веб-страниц, изображений предпросмотра низкого разрешения, иконок, миниатюр, и в том случае, если нужно использовать растровый формат как единственный доступный вариант. PNG это современный и широко поддерживаемый формат для растровых изображений с хорошим сжатием без потерь и поддержкой модных опций, включая полную поддержку прозрачности.
- SVG (Scalable Vector Graphics) для последующего редактирования и обработки. SVG это современный формат векторной графики. Его можно открыть в редакторе векторной графики, например, в Inkscape и изменить или скомбинировать с другими изображениями – сохраняя весь текст и линии идеально ровными и чистыми.



Снимок экрана окна экспорта изображений, показывающий страницу настроек «Основные».

Настройки экспорта изображений поделены на несколько групп, как показано на рисунке выше.

Основные

Основные настройки задают различные общие размеры и масштабы. Часть Физические размерыотличается для растровых и векторных изображений. Для растровых изображений физические размеры задаются в следующем виде:

Увеличение Масштабирование пикселей данных в пиксели изображения. Установленный по умолчанию масштаб 1 означает что точкам данных точно соответствуют пиксели изображения. Увеличение возможно с масштабом больше 1 и уменьшение с масштабом меньше 1. Для данных с неквадратными пикселями, показываемыми в режиме физического соотношения сторон, масштабирование применяется к более короткой стороне пикселя, независимо от того, какой она будет.

Ширина Ширина прямоугольника, соответствующего данным в экспортированном изображении (не ширина изображения целиком), в пикселях.

Высота Высота прямоугольника, соответствующего данным в экспортированном изображении (не высота изображения целиком), в пикселях.

Векторные изображения не имеют конечного пиксельного разрешения, поэтому, физические размеры могут быть заданы следующим образом:

Размер пикселя размер одного пикселя данных в миллиметрах.

Пикселей на дюйм Число пикселей данных на один дюйм.

Ширина Ширина прямоугольника, соответствующего данным в экспортируемом изображении (не ширина изображения в целом), в миллиметрах.

Высота Высота прямоугольника, соответствующего данным в экспортируемом изображении (не высота изображения в целом), в миллиметрах.

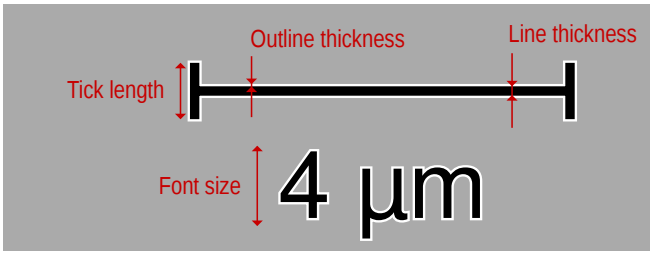


Иллюстрация основных параметров размеров.

Остальные параметры размеров и масштабов, обозначенные как Параметры, являются общими для обоих типов изображений. Однако, для растровых изображений, значения представлены в пикселях, в то время, как для векторных они измеряются в типографских точках. Более точно, это будет так если они заданы как абсолютные, т.е. опция Привязать размеры к пикселям данных не выбрана. При выборе этой опции все размеры измеряются в относительных величинах к пикселям данных, т.е. они масштабируются вместе с данными изображения при изменении физических размеров. Параметры, проиллюстрированные на картинке выше, включают в себя:

Шрифт Шрифт, используемый для отрисовки всех меток.

Размер шрифта Размер шрифта, в пикселях или типографских точках как описано выше.

Толщина линии Толщина линий: границы, засечки, вложенный масштабный отрезок и выделенные элементы.

Толщина контура Толщина контуров, которые могут быть нарисованы вокруг вложенного масштабного отрезка и выделенных элементов.

Ширина границы Ширина пустой границы вокруг всего изображения.

Длина засечек Длина засечек на шкалах линейных размеров и псевдоцвета. Эта опция также управляет длиной засечек на масштабном отрезке и крестиков, рисуемых для выбранных точек.

Настройка запятая как десятичный разделитель позволяет управлять форматом чисел. По умолчанию используются десятичные точки, даже если настройки локали задают запятые. Включение этой опции меняет точки на запятые, снова независимо от настроек локали.

И, наконец, настройки в меню Цвет позволяют управлять общими цветами изображения. Цвет линий и текста управляет цветом всех линий и меток, рисуемых вне области изображения, поверх фона. Фон может быть прозрачным (включается с помощью переключателя Прозрачный фон) если формат изображения, в который сохраняется, поддерживает эту возможность — на данный момент это поддерживается в PNG, WebP и во всех векторных форматах. В противном случае фон рисуется сплошным цветом, который можно поменять с помощью элемента управления Цвет фона.

Горизонтальный масштаб

Настройки на вкладке Латеральные размеры управляют отображением горизонтальных размеров и единиц измерения. Два основных варианта представлены на рисунке снизу: это линейки и вложенный масштабный отрезок. Также можно полностью выключить отображение горизонтальных размеров. Для вложенного масштабного отрезка доступны следующие настройки:

Длина Длина отрезка может быть выставлена вручную на произвольное значение, которое не сделает его слишком коротким или слишком длинным. Нажмите Enter чтобы обновить изображение предпросмотра после изменения длины. Кнопка Авто выбирает подходящую длину автоматически (это же происходит если введённая вручную длина не подходит для данного изображения).

Размещение Отрезок может быть помещён вдоль верхнего или нижнего края и быть выровнен влево или вправо либо центрирован.

Горизонтальный _зазор: Горизонтальный зазор между отрезком и ближайшей вертикальной стороной области данных (имеет смысл только если отрезок не центрирован).

Вертикальный зазор Вертикальный зазор между отрезком и ближайшей горизонтальной стороной области данных.

Цвет Цвет, которым будет нарисован отрезок. Кнопки Чёрный и Белый позволяют быстро выбрать основные цвета.

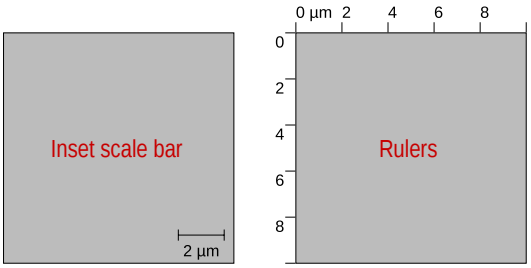
Цвет контура Цвет контуров. При нулевой толщине контура, установленной по умолчанию, контура не рисуются, следовательно изменение этого цвета никак не влияет на изображение.

Непрозрачность Прозрачность масштабного отрезка. Этот параметр позволяет рисовать масштабный отрезок полупрозрачным.

Рисовать засечки При включенной опции у отрезка рисуются вертикальные засечки на концах. При отключенной он рисуется простой линией.

Рисовать подпись При включенной опции над или под отрезком рисуется его длина.

Текст сверху от отрезка При включенной опции длина отрезка рисуется над ним, при выключенной под ним.



Типы визуализации латеральных размеров.

Значение

Настройки на вкладке Значения управляет отрисовкой значений и шкалы псевдоцвета. Две основные настройки управляют отрисовкой поля данных:

Интерполяция Тип интерполяции может стать заметным, в частности, при больших увеличениях. В случае векторных изображений, финальная отрисовка происходит при просмотре или печати изображения. Следовательно, доступные виды интерполяции ограничены двумя вариантами: интерполяцией округлением, при которой каждый пиксель данных отображается резким прямоугольником, и линейной, при которой значения данных интерполируются линейно между оригинальными пикселями. В случае растровых данных, можно выбирать из полного набора интерполяций, поддерживаемых в Gwyddion.

Рисовать маску если включено, маска рисуется поверх данных тем же цветом, что и в окне данных.

Если есть маска и она показывается, то можно опционально добавить легенду к маске под изображением как показано на следующем рисунке, если включена опция Рисовать легенду маски. Подпись может быть задана произвольно с помощью опции Подпись и зазор контролируется опцией Вертикальный зазор.

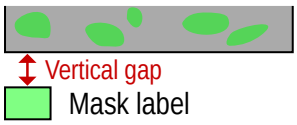
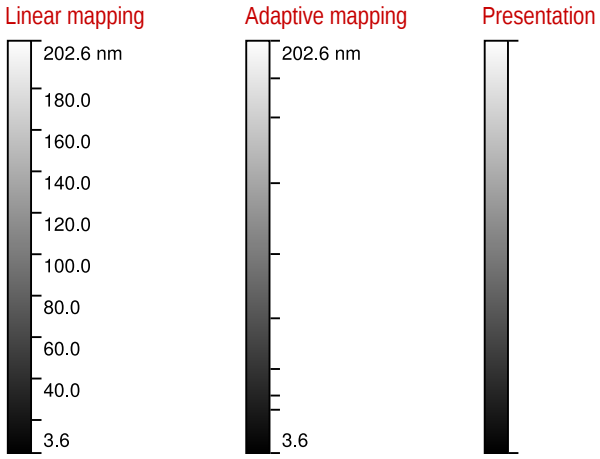


Иллюстрация подписи к маске, размещённой под изображением и контролирующих её параметров.

Масштаб значений может быть либо отрисован в виде шкалы псевдоцвета, либо отключен. Шкала рисуется несколько по разному в зависимости от выбранного типа отображения шкалы псевдоцвета, как показано на следующем рисунке.



Отрисовка шкалы псевдоцвета зависит от типа отображения. Для обычного линейного отображения, либо с полным, либо с фиксированным диапазоном, рисуются засечки со значениями. Для адаптивной шкалы цветовой градиент рисуется таким же, но положения засечек соответствуют адаптивному отображению и внутренние засечки рисуются без подписей (чтобы избежать их наложения друг на друга). Если показывается презентация, значения считаются масштабированными произвольно и, следовательно, не показывается ни подписанных значений, ни внутренних засечек.

Можно задать число знаков в десятичном представлении значений по осям путём включения опции фиксированная точность и задания нужного числа. В противном случае нужная точность определяется автоматически.

Автоматический выбор единиц измерения для масштаба шкалы псевдоцвета может быть настроен с помощью опции Фиксированный порог префиксов. Она задаёт порог переключения на следующую степень 10^3, т.е. с нм на мкм или от пА к нА. Например, если задать этот параметр равным 400, то максимальная абсолютная высота в 399 нм будет отображаться как 399 нм, в то время, как высота в 401 нм будет отображаться как 0,401 мкм. Порог применяется ко всем степеням 10^3, поэтому такая же настройка единиц измерения будет переключать с мВ на В при 400 мВ и с пА на нА при 400 пА.

Заголовок изображения может быть добавлен при необходимости либо сверху изображения, либо вдоль шкалы псевдоцвета. Используя флаг Поместить единицы измерения в заголовок, можно выбрать между размещением единиц измерения значений в заголовке или на шкале псевдоцвета. Если заголовок не рисуется, то при выбранном этом флаге единицы измерения вообще не отображаются.

Настройки Горизонтальный зазор для шкалы псевдоцвета и Зазор для заголовка управляют зазорами между ними и соответствующими границами изображения, как показано на следующем рисунке. Если заголовок канала рисуется вдоль шкалы псевдоцвета, зазор может быть отрицательным, перемещая заголовок чуть-чуть внутрь шкалы. Для заголовков вдоль верхнего края отрицательные значения зазора игнорируются.

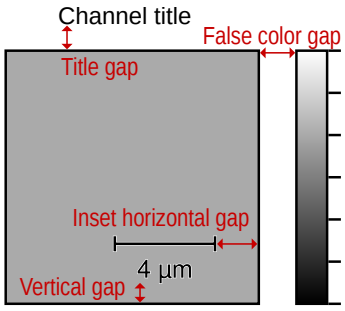


Иллюстрация различных настроек зазоров (для заголовка канала, расположенного сверху).

Выделение

Любая разновидность выделенных элементов, сохранённых вместе с данными, может быть также показана на изображении. Если выбран флаг Рисовать выделенные элементы, то можно выбирать элементы для отображения из списка ниже. Цвета задаются тем же образом, что и для вложенного масштабного отрезка.

Цвет Цвет отрисовки выделенных элементов. Кнопки Чёрный и Белый позволяют быстро выбрать основные цвета.

Цвет контура Цвет контуров. При нулевой толщине контура, установленной по умолчанию, контура не рисуются, следовательно изменение этого цвета никак не влияет на изображение.

Непрозрачность Прозрачность выделенных элементов. Эта опция позволяет рисовать их полупрозрачными.

Помимо цветов, некоторые виды выделенных объектов имеют дополнительные настройки, например, нужно ли нумеровать отдельные элементы. При использовании инструментов, которые выделяют некоторые элементы на изображении, вид отображаемых выделенных элементов и специфичные настройки устанавливаются в соответствие с текущим инструментом. Обычно это наиболее простой способ отобразить выделенное как было задумано. Однако, можно рисовать любые выделенные элементы из имеющихся и настраивать их опции вручную при желании.

Предустановки

Различные наборы настроек отрисовки изображений будут полезными в разных случаях. Наборы настроек можно сохранить и использовать позднее. Список во вкладке Предустановки показывает все сохранённые наборы настроек, которыми можно управлять с помощью кнопок ниже:

Загрузить Загружает выбранный набор настроек, т.е. устанавливает настройки отображения в соответствии с предустановками. Длина вложенного масштабного отрезка может быть установлена автоматически, если хранящаяся в файле предустановок будет признана неподходящей. Кроме того, выбор выделенных объектов и их настройки будут сохраняться неизменными, будут установлены только цвета в соответствии с предустановками.

Сохранить Сохраняет текущие настройки под именем, заданным как Название набора настроек. Это название также служит именем файла, поэтому рекомендуется избегать непечатных символов в данных названиях. Если набор настроек с таким именем уже существует, он будет перезаписан.

Переименовать Переименовывает текущий выбранный набор настроек в значение, заданное как Название набора настроек. Набор настроек не требуется загружать для переименования. Невозможно перезаписать уже имеющийся набор настроек с помощью переименования.

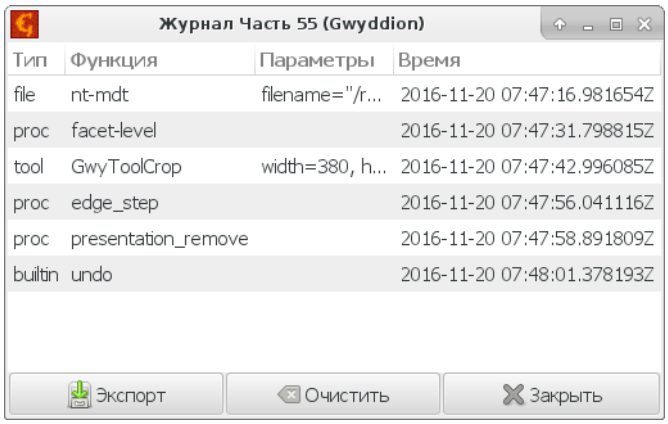
Удалить Удаляет текущий выбранный набор настроек.

3.17 Журналирование

Gwyddion записывает операции изменения данных для каждого изображения, каждого блока объёмных данных или данных XYZ в так называемый журнал. При сохранении данных в файл .gwy, журнал сохраняется вместе с ними. Журнал можно вывести на экран выбрав команду Просмотр журнала в контекстном меню, открываемом при щелчке правой кнопкой мыши по окну соответствующего окна данных. Это может оказаться полезным чтобы позднее вспомнить какие коррекции данных были произведены, каким образом создавалась маска или презентация, и т.п. Следует отметить, что данные журнала являются информационными, они не предназначены и не подходят для задач учёта и контроля.

Открыт просмотр журнала: если оставить его открытым, можно видеть как туда добавляются операции обработки данных по мере их использования.

Простой пример журналирования представлен на следующем рисунке. Для каждой операции записывается её тип, название, параметры и время. Тип может быть, например, операцией импорта файла, функцией обработки данных или применением инструмента из меню. Имена функции соответствуют показанным в окне просмотра модулей (Информация → Просмотр модулей), где они указаны в разделе Зарегистрированные функции для каждого модуля, или в онлайновом списке модулей. Список параметров представляет настройки функции на момент её вызова. Поскольку журнал является только информативным, параметры могут позволять, а могут и не позволить восстановить или повторить применяемую функцию. Для обычных простых операций их должно быть достаточно. Для сложных или интерактивных операций, тех, в которых участвует несколько изображений, глубины деталировки журнала может не хватить. Время записывается как местное в данном часовом поясе в момент применения операции, оно не пересчитывается при пересылке файла в другие части света и при открытии его в другом часовом поясе.



Просмотр журнала демонстрирует простой журнал обработки данных для изображения, начиная от импорта его из фирменного формата установки СЗМ и продолжая применением функций обработки данных, инструментов и отменой операций.

Весь файл журнала может быть экспортирован в текстовый файл используя кнопку Экспорт. Нельзя менять элементы журнала, поскольку это в какой-то мере противоречит идее его использования, но можно удалить журнал целиком кнопкой Очистить.

Отключение журналирования

В некоторых случаях может потребоваться сохранить или опубликовать файлы .gwy без журналов. Для этого журналированием можно управлять на нескольких уровнях:

- Журналирование можно включить и выключить глобально используя пункт меню Правка → Включить журналирование. При отключенном журналировании новые элементы не добавляются в журнал. Имеющиеся журналы при этом не удаляются и их по прежнему можно просмотреть. Они также по прежнему будут сохраняться в файлы .gwy.
- Журнал для определённого изображения, объёмных данных или данных XYZ можно очистить кнопкой Очистить в окне просмотра.
- Все журналы в текущем файле можно удалить с помощью пункта меню Файл → Удалить все журналы. Как и с любой другой операцией над файлами, файл нужно после этого сохранить, чтобы удаление журнала повлияло на файл, сохранённый на диске. И, естественно, если журналирование осталось включено и вы продолжите редактирование данных, будут созданы новые журналы и новые операции будут снова записаны туда.

3.18 Импорт неизвестных файлов данных

С помощью модуля rawfile можно импортировать как неизвестные текстовые и двоичные файлы данных, так и файлы не поддерживаемых форматов если приложить определённые усилия. Импорт неизвестных данных может быть явно вызван при выборе типа Импорт неизвестных файлов данных в диалоговом окне открытия файлов. Также можно настроить Gwyddion чтобы этот вариант автоматически вызывался при открытии файла неизвестного формата. Этот вариант включается в диалоговом окне открытия неизвестных файлов опцией Автоматически предлагать импорт необработанных данных для файлов неизвестного типа.

Информация

Первая вкладка Информация, позволяет задать основную информацию о файле:

Горизонтальный размер, Вертикальный размер Горизонтальное и вертикальное разрешение блока данных (количество семплов).

Квадратный семпл Исправляет горизонтальное и вертикальное разрешение, делая их одинаковыми.

Ширина, Высота Физические размеры семпла.

Одинаковые физические размеры Сохраняет одинаковое соотношение между физическими измерениями и числом сэмплов для горизонтального и вертикального направлений, делая пиксели данных квадратными.

Масштаб Z (на единицу дискретизации) Множитель, на который надо умножать значения данных чтобы получить физические значения.

Замена отсутствующих значений Особое значение, которое обозначает пропущенные данные. Обычно используется одно из крайних значений доступного диапазона, например, -32768 для 16битных данных со знаком. Для текстовых данных также возможно задать строку, например, BAD или NODATA, которая будет заменять в файле отсутствующие данные.

Если включена обработка отсутствующих данных, все пиксели с заданным заменяющим их значением будут покрыты маской и заменены на нейтральное значение в импортируемом поле данных.

Неверные значения (не число, not-a-number, NaN) в типах данных с плавающей точкой помечаются маской и заменяются автоматически. Таким образом, вам надо включать замену только если для обозначения отсутствующих данных используется некоторое другое (конечное) значение.

Формат данных

На второй вкладке, Формат данных, может быть задан конкретный формат данных. Есть два независимых варианта: Текстовые данные и Двоичные данные.

Текстовые файлы считаются организованными по строкам, каждая строка содержит один ряд данных, данные представлены в виде целых чисел или чисел с плавающей запятой в стандартной нотации. Доступны следующие опции:

Начать со строки Строка, с которой начинаются данные, т.е. число строк, которые надо пропустить с начала файла. Распознаются все маркеры конца строки (Unix, MS-DOS, Macintosh).

После каждой строки пропустить Число полей, которое нужно игнорировать в начале каждой строки.

Разделитель полей, Другой разделитель Если разделитель установлен в Любой пробельный, то любое ненулевое количество пробельных символов считается как разделитель полей. Если выбран символ пробела, разделителем должен быть этот символ. В противном случае поля разделяются заданным символом или строкой, и все пробельные символы вокруг разделителей игнорируются.

Десятичный разделитель - запятая По умолчанию считается что числа с плавающей точкой используют десятичную точку. Эта опция меняет её на запятую.

Следующие опции доступны для двоичных файлов:

Двоичные данные Можно выбрать один из заранее определённых стандартных форматов данных, или выбрать Определённый пользователем чтобы задать формат со странным числом бит на сэмпл данных или другими особенностями.

Шаблон взаимной замены байтов Как разделяются сэмплы данных. Эта опция доступна для предопределённых форматов длиннее одного байта. Её биты соответствуют группам байт, которые нужно поменять: если задан j-й бит, соседние группы по 2^j бит меняются местами.

Например, значение 3 означает на то, что сэмпл будет делиться на пары (бит 1) байт и соседние пары байт меняться местами, и затем делиться на отдельные байты (бит 0) и соседние байты меняться местами. Общим эффектом будет инверсия порядка следования байт в группах по четыре байта. В общем случае, если нужно поменять порядок байт в группах длиной 2^j, что является наиболее распространённым случаем, используйте шаблон замены байт $j-1$.

Начать со смещения Смещение в файле, в байтах, откуда начитаются данные.

Размер сэмпла Длина одного сэмпла в битах для заданных пользователем форматов. Например, если у вас есть файл с 4 битами на отсчёт, напишите здесь 4. Для предопределённых форматов размер сэмпла показывается, но не доступен для изменения.

После каждого сэмпла пропустить Число бит, которое нужно пропустить после каждого сэмпла.

Обычно сэмплы находятся в файле рядом друг с другом. Но иногда между ними попадаются неиспользуемые биты или байты, которые можно задать с помощью этой опции. Следует отметить, что для предопределённых типов значение должно быть кратно 8 (т.е. можно пропускать только целые байты).

После каждой строки пропустить Количество бит, которое нужно пропустить после каждой строки в дополнение к битам, пропущенным после каждого сэмпла.

Обычно строки находятся в файле рядом друг с другом. Но иногда между ними попадаются неиспользуемые биты или байты, которые можно задать с помощью этой опции. Следует отметить, что для предопределённых типов значение должно быть кратно 8 (т.е. можно пропускать только целые байты).

Обратить порядок битов в байтах Нужно ли поменять порядок бит в каждом байте на обратный.

Обратить порядок бит в семплах Нужно ли поменять порядок бит в каждом сэмпле на обратный для сэмплов, определяемых пользователем.

Семплы со знаком Будут ли сэмплы интерпретироваться как значения со знаком (в противоположность к значениям без знака). Для предопределённых форматов их знаковость показывается, но её нельзя изменить.

Предустановки

Настройки импорта могут быть сохранены как предустановки. что позволяет легко ипротировать тот же фай или такие же форматы файлов позднее.

Кнопка Сохранить сохраняет текущие настройки импорта под именем, задаваемым полем Название предустановки. Переименовать переименовывает текущий выбранный пресет на выбранное имя, Удалить удаляет выбранный пресет и Загрузить заменяет текущие настройки импорта сохранёнными предустановками.

3.19 Импорт особых данных

Импорт некоторых других типов данных не происходит автоматически и требует вмешательства человека.

Графические форматы

Импорт данных из файлов изображений, таких как PNG, TIFF, JPEG и BMP, похож на импорт необработанных данных/неизвестных форматов файлов, только происходит проще.

Он проще, поскольку структура файла известна и формат файла определяется автоматически. Следовательно, тип файла не требуется явно указывать. Однако, интерпретация данных по прежнему неизвестна и должна быть задана вручную. Следовательно, диалоговое окно импорта изображений напоминает вкладку Информация импорта необработанных файлов и требует от вас задания физических размеров и масштаба значений.

Следует отметить, что физические размеры, подсказываемые здесь, не получены из файла, это просто последние использованные значения. Некоторые форматы данных СЗМ основаны на формате изображений (обычно, в основе лежит TIFF) и содержат информацию о физических размерах и единицах измерения, хотя и сохранённых особым для этого изготовителя образом. В этом случае может быть написан отдельный модуль импорта для этого особого формата чтобы загружать файлы автоматически с правильно масштабированными значениями.

См. справочный раздел форматы изображений с большой глубиной цвета для дополнительной информации о них и о возможности их использования для представления данных.

Для обычных (не СЗМ) изображений также есть опция Просто использовать пиксели для задания пространственных размеров. Эта опция задаёт физические размеры равными пиксельным. Они могут быть всё равно настроены позже, например используя Размеры и единицы измерения.

Стек изображений как объёмные данные

Многостраничное изображение (стек изображений) также может быть импортировано как объёмные данные вместо кучи изображений. Это включается опцией Импортировать как объёмные данные. В настоящее время эта опция существует только для многостраничных документов в формате TIFF.

Координата z импортируемых данных будет просто номером изображения в стеке (начиная с 0). Можно использовать функции для объёмных данных Размеры и единицы измерения или Калибровка по Z для задания физического масштаба и/или единиц измерений оси z.

Кривые графиков

Простые текстовые файлы в две колонки, содержащие данные кривых, могут быть импортированы как кривые графиков. В некоторых случаях эти файлы могут быть распознаны автоматически. Также они могут быть явно выбраны как Файлы ASCII с кривой графика в диалоговом окне открытия файлов, заставляя модуль импорта чуть сильнее постараться загрузить этот файл как данные графика.

Диалоговое окно импорта позволяет предварительно просмотреть график и задать единицы измерения и подписи к осям.

Данные XYZ

Текстовые файлы в три колонки, содержащие данные XYZ, импортируются выбором типа файла Импорт файлов данных XYZ. Снова, они могут распознаваться автоматически, но задание в явном виде формата файла заставляет модуль принудительно загружать файл как данные XYZ.

Диалог импорта данных показывает количество точек и физические размеры данных и позволяет установить единицы измерения как в горизонтальной плоскости, так и значений. Отображаемые диапазоны в физических единицах измерения обновляются автоматически в соответствии с введёнными единицами измерения, таким образом можно сразу убедиться, что они выбраны правильно.

Иногда могут встретиться данные, сохраненные как данные XYZ с полностью упорядоченными пространственными координатами. Поскольку по прежнему предполагается, что они будут обрабатываться как данные изображений, просто сохраненные в странном формате, модуль импорта пытается отследить данную ситуацию. Затем он предлагает напрямую отобразить данные в изображение вместо того, чтобы импортировать файл как настоящие данные XYZ.

Данные XYZ Nano Measuring Machine

Данные Nano Measuring Machine это наборы обычно больших файлов XYZ которые было бы проблематично, если вообще возможно, обрабатывать в Gwyddion нормально. Следовательно, они напрямую растеризуются в изображение при импорте. Выберете основной файл описания (.dsc) для того, чтобы открыть набор файлов данных и задать параметры импорта.

Обычно вертикальный размер должен быть выбран равным числу профилей (т.е. числу файлов данных). Однако, большее разрешение может также оказаться полезным. Если вы включите опцию Одинаковый масштаб, то импортируемое изображение будет иметь квадратные пиксели. При этом можно вводить только одно из разрешений, второе будет определяться автоматически.

На 64битных системах модуль импорта может обрабатывать до 2^{32} точек в канале, в то время, как общее количество точек данных не ограничено. Следует отметить, что чтение точек данных может занять значительное время. Выбирайте только те каналы, которые вас интересуют, чтобы ускорить процесс импорта.

Данные Nanonis SXM

Nanonis использует координатную систему, подчиняющуюся правилу правой руки, а Gwyddion левой руки. Следовательно, невозможно одновременно сохранить то, как изображения выглядят визуально и абсолютные координаты изображений и их особенностей – последнее требуется для корректного импорта спектров.

Поведение по умолчанию менялось между версиями. Начиная с версии 2.52 можно задать поведение установив значение параметра /module/nanonis/preserve_coodinates в настройках программы:

- False означает, что изображения выглядят одинаково, но вертикальные координаты перевёрнуты.
- True означает, что координаты будут правильными, но изображения будут выглядеть перевёрнутыми вертикально.

3.20 Экспорт текстовых данных

Экспорт данных в текстовый файл нередко может быть полезно для дальнейшей обработки в других программных пакетах поскольку текстовые файлы очень просто переносятся.

Данные изображения Данные изображений можно экспортировать просто выбрав пункт меню Файл → Сохранить как и выбрав разрешение .txt в диалоговом окне экспорта или выбрав вариант Матрица данных ASCII (.txt) в диалоговом окне сохранения файла. При этом текущий канал данных записывается как матрица значений, каждая строка в файле соответствует одной строке изображения. Опционально экспорт всех каналов может быть склеен вместе и записан в один файл (разделённый пустыми строками).

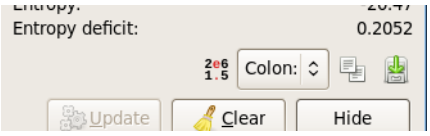
Точно такой же метод можно применить для экспорта данных изображений в текстовые файлы с тремя колонками как данных в формате XYZ. Достаточно просто выбрать расширение имени файла .xyz или формат файла текстовые данные XYZ (.xyz).

Кривые графиков Кривые графиков экспортируются из меню Экспортировать текст либо из меню График либо из контекстного меню, которое открывается при щелчке правой кнопкой мыши по окну графика.

Объёмные данные Подобным же образом данные экспортируются используя подменю Экспортировать текст из меню Объёмные данные.

Табличные данные

Большое число функций, которые рассчитывают список или набор значений предлагают их экспорт в виде табличных данных. На следующем рисунке показан пример на основе инструмента расчёта статистических величин.



Элементы управления для экспорта табличных данных, слева направо: переключатель формата данных в научный формат, выбор формата данных, кнопки копирования в буфер обмена и сохранения в файл.

Переключатель формата данных в научный управляет тем, будут ли данные записаны в машиночитаемом научном формате, с десятичной точкой (независимо от настроек языка и локали) и e для степеней 10. Когда он включен, данные записываются в основных системных единицах – например, метрах, а не микронах или километрах. В результате получается выходные данные вроде таких:

```
Minimum: 3.32e-9 m
Maximum: 1.20e-9 m
```

С человекочитаемым форматом (научное представление выключено), те же данные будут выглядеть как:

```
Minimum: 3,32 nm
Maximum: 1,20 nm
```

если Gwyddion запущен в окружении, где используется запятая в качестве разделителя дробной части числа.

Общий формат табличных данных контролируется переключателем формата данных, для которого доступны следующие варианты (не все могут присутствовать, если они не имеют смысла в данном месте):

Двоеточие: Более-менее свободный формат, предназначенный в основном быть читаемым человеком. Подписи данных отделены двоеточием, значение и единицы просто печатаются вместе и выровнены по вертикали:

```
Maximum peak height (Sp): 6.6754 nm
Maximum pit depth (Sp):   6.1039 nm
Maximum height (Sz):      12.7793 nm
```

TAB Фиксированное число столбцов – обычно название, значение, погрешность (ошибка), единицы измерения – разделенные символом TAB (ASCII 9). Предыдущий пример будет выглядеть как:

```
Maximum peak height (Sp)↦6.6754↦↦nm
Maximum pit depth (Sp)↦6.1039↦↦nm
Maximum height (Sz)↦12.7793↦↦nm
```

где ↦ обозначает символ TAB (табуляции). Следует отметить пустой столбец погрешностей значений в данном примере. Если таблица может содержать ошибки при определённых обстоятельствах, что для статистических величин будет при наличии для данного поля данных погрешностей измерения, соответствующий столбец будет всегда присутствовать, даже если эти данные будут пустыми. Это предотвращает несоответствие форматов в случае наличия и отсутствия погрешностей.

CSV Значения, разделенные запятыми, обычный (хотя и не стандартизированный) формат с фиксированным числом столбцов, разделенных запятыми. Иногда используются точки с запятой, несмотря на имя, но Gwyddion записывает файлы всегда с запятой в качестве разделителя. Предыдущий пример будет выглядеть как:

```
"Maximum peak height (Sp)","6.6754","","nm"
"Maximum pit depth (Sp)","6.1039","","nm"
"Maximum height (Sz)","12.7793","","nm"
```

Глава 4

Обработка и анализ данных

Количество и широта функций обработки и анализа данных – одни из главных достоинств Gwyddion. Эта глава посвящена описанию принципов их работы и возможных применений. Особое внимание уделялось объяснению того, как они работают и что они делают или рассчитывают. Также местами описываются элементы их интерфейса там, где это может быть полезно, но при этом считается, что читатель знаком с основами организации данных и элементов управления Gwyddion, описанными в предыдущей главе.

4.1 Базовые действия

Считывание значений и основные геометрические операции представляют собой основу любой программы обработки данных. Gwyddion предлагает большой набор функций для масштабирования данных, вращения, изменения количества точек и извлечения профилей. Данный раздел описывает эти простые, но нужные функции.

Большинство основных операций можно найти в меню Обработка данных → Базовые действия, некоторые из них также можно проводить с помощью инструментов.

Простейшие геометрические преобразования

Геометрические преобразования из этой группы сохраняют пиксели, т.е. один пиксель изображения после преобразования в точности соответствует одному пикселю исходного изображения. Интерполяция не используется.

Перевернуть

Перевернуть данные горизонтально (т.е. относительно вертикальной оси) или вертикально (т.е. относительно горизонтальной) или относительно диагонали (т.е. меняя местами строки и столбцы) можно с помощью операций Обработка данных → Базовые действия → Перевернуть горизонтально, Перевернуть вертикально и Перевернуть обе оси, соответственно.

Поворот на угол, кратный 90°

Поворот данных на углы, кратные 90 градусам можно произвести используя простые функции поворота: Обработка данных → Базовые действия → Повернуть по часовой, Повернуть против часовой или Перевернуть обе оси. Отражение по обеим осям поворачивает изображение на 180°.

Обрезка

Инструмент обрезки может кадрировать изображение либо на месте, либо помещая результат в новое изображение (с включенной опцией Создать новое изображение). С включенной опцией Сохранять пространственные смещения, координаты верхнего левого угла результирующего изображения соответствуют верхнему левому углу выбранной области, в противном случае, координаты верхнего левого угла устанавливаются в (0,0).

Расширение

Обработка данных → Базовые действия → Расширить

Расширение фактически обратная операция к обрезке. Разумеется, добавить новые настоящие данные вокруг границы изображения можно только измеряя дополнительные данные. Поэтому данная функция предлагает вместо этого несколько простых методов искусственного расширения, такие как зеркальное и незеркальное периодическое продолжение или повтор граничных значений. Метод Лапласа работает таким же образом, как Удалить данные под маской и создаёт гладкое расширение которое сходится к среднему значению всей границы изображения.

Преобразования с интерполяцией

Преобразования в этой группе не отображают один пиксель в один пиксель и требуют интерполяции.

Масштабирование

Обработка данных → Базовые действия → Масштабировать

Изменить шаг дискретизации данных для получения другого размера в пикселях (количества строк и столбцов пикселей в изображении) с использованием выбранного метода интерполяции. Физические размеры при этом остаются неизменными.

Если нужно задать физические размеры одного пикселя, используйте вместо этого Передискретизировать.

Сделать квадратным

Обработка данных → Базовые действия → Квадратный образец

Увеличить разрешение данных (вдоль оси с большим размером пикселя) чтобы сделать пиксели квадратными. В большинстве сканов пиксели имеют соотношение сторон 1:1, следовательно эта функция не действует на них.

Передискретизировать

Обработка данных → Базовые действия → Передискретизировать

Изменить шаг дискретизации данных для получения другого размера в пикселях с использованием выбранного метода интерполяции. Размеры пикселя можно задать такими, чтобы они соответствовали другому изображению, что требуется для ряда операций над множественными данными. Физические размеры при этом остаются неизменными.

Если вы хотите задать число строк и столбцов в изображении или относительный масштаб, то нужно использовать опцию Масштаб.

Поворот на произвольный угол

Функция Обработка данных → Базовые действия → Поворот поворачивает изображение на произвольный угол. В отличие от простых геометрических преобразований выше, эта операция требует использования интерполяции, метод которой может быть задан в диалоговом окне.

После поворота изображение не является больше прямоугольным со сторонами параллельными осям. Опция размер результата задаёт область, которая будет результирующим изображением:

- Такой же как исходное сохраняет размер изображения, обрезая часть данных и добавляя немного пустых внешних данных по углам.
- Расширен до полных данных обеспечивает отсутствие обрезки части изображения - что обычно означает что результат содержит много внешних пустых данных.
- Обрезан до верных данных обеспечивает, что результирующее изображение не содержит пустого окружения - что обычно означает, что оно будет значительно обрезано по краям.

Маска может опционально накладываться на пиксели, соответствующие внешней по отношению к исходному изображению области.

Биннинг

Обработка данных → Базовые действия → Биннинг

Биннинг это альтернативный метод уменьшения размера. Получаемое в результате изображение создаётся не интерполяцией оригинала в заданных точках, а вместо этого усреднением всех пикселей исходного изображения вносящих вклад в пиксель результирующего.

Прямоугольный блок пикселей, который усредняется, называется корзиной. Можно управлять его размерами используя настройки Ширины и Высоты, которые также являются масштабирующими делителями в соответствующих направлениях. Начало первой корзины можно сместить относительно начала изображения. Следует однако отметить, что результат формируется только полными корзинами, неполные на границах изображения игнорируются.

Усечённое среднее можно использовать вместо стандартного усреднения, где Усекать наименьшие и Усекать наибольшие управляют тем, сколько наименьших и наибольших значений будет отброшено перед усреднением. Это может быть полезно для подавления локальных выпадающих значений. Если включено Суммировать вместо усреднения, то результирующее значение будет суммой всех вносящих вклад значений. Это не будет иметь смысла для типичных данных топографии. Однако, если изображение представляет собой значения типа плотности, интеграл которых должен сохраняться, то суммирование будет более правильной операцией.

Преобразования значений

Функции в этой группе сохраняют пиксели 1:1. Однако, при этом они модифицируют их значения. См. также модуль арифметики над данными, который позволяет проводить манипуляции над данными используя арифметические выражения.

Инвертировать значение

Обработка данных → Базовые действия → Инвертировать значение

Функция инверсии инвертирует значения относительно среднего, оставляя его неизменным.

Ограничить диапазон

Обработка данных → Базовые действия → Ограничить диапазон

Диапазон данных может быть ограничен обрезанием данных, выходящих за заданный интервал. Интервал может быть задан численно или взят из диапазона псевдоцвета, заданного ранее используя инструмент диапазон псевдоцвета Также возможно отсечь выпадающие части изображения, выступающие дальше, чем умноженное на заданное число среднеквадратичное отклонение от среднего значения.

Переназначить значения

Обработка данных → Базовые действия → Переназначить значения

Периодические данные, такие как углы, иногда сохраняются с неудобным зацикливанием, которое заставляет их выглядеть прерывистыми. Например, диапазон значений лежит от 0 до 360 градусов, но данные были бы непрерывными если представлены в диапазоне от -180 до 180 градусов. Простая циклическая перестановка при этом восстанавливает непрерывность.

Функция имеет два параметра. Диапазон это диапазон значений (период в направлении z). Смещение задаёт значение, по которому будет проводиться разделение при пересчёте. Точная формула будет

$$z_i \to \mathrm{fmod}(z_i - \Delta, r) + \Delta$$

Символы r и Δ представляют диапазон и смещение, соответственно. Функция fmod это функция вещественного остатка от деления.

Размеры и единицы измерения

Обработка данных → Базовые действия → Размеры и единицы измерения

Изменить физические размеры, единицы измерения или масштабы значений, а также горизонтальные смещения. Это может пригодиться для исправления необработанных данных, которые были импортированы с неправильными физическими масштабами, или как простая ручная перекалибровка шкал размеров и значений.

Замечание Настройки запоминаются между вызовами. Перекалибровки могут быть заданы или абсолютными значения, т.е. задавая определенные значения диапазонов горизонтальных размеров и значений, или как коррекции, применяя множитель и/или смещение. Это позволяет применять одинаковую перекалибровку единообразно для нескольких наборов данных. В дополнение несколько специальных режимов могут, например, задать размер пикселя точно равным другому изображению.

Уклон

Обработка данных → Базовые действия → Наклон

Наклонить данные на заданное численно значение градиента или угла.

Считывание значений

Простейший способ чтения данных это поместить курсор мыши поверх точки, в которой необходимо считать значение. Координаты при этом показываются в строке состояния окна данных или окна графика.

Инструмент считать значение

Инструмент Считать значение предлагает больше вариантов считывания данных: он показывает координаты и значения в последней точке окна данных, где была нажата кнопка мыши. Он также показывает увеличенный фрагмент изображения вокруг заданной точки.

Инструмент может усреднить значение в круговой окрестности выбранной точки, это управляется опцией Радиус усреднения. Если этот радиус равен 1, показывается значение в единичной точке (как делает простейший метод). Кнопка Установить ноль сдвигает поверхность таким образом, чтобы сделать текущее значение z новым нулевым уровнем.

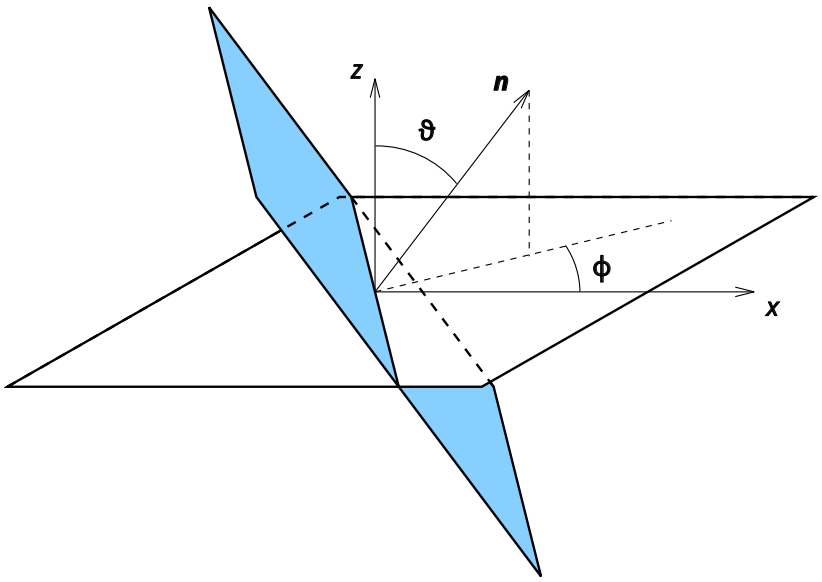
Считать значение также может показывать наклон локальной грани или локальную кривизну поверхности. Радиус усреднения снова определяет радиус области, используемой для аппроксимации плоскостью. Кривизна. в частности, требует относительно больших площадей чтобы быть достоверной.

Наклоны

Во всех инструментах Gwyddion, наклоны плоскости и грани показываются в сферических углах (ϑ, φ) вектора нормали к плоскости.

Угол ϑ является углом между направлением вверх и нормалью, это означает, что $\vartheta = 0$ для горизонтальных граней и увеличивается с наклоном. Угол всегда больше нуля.

Угол φ — угол между осью x и проекцией нормали на плоскость xy, отсчитываемый против часовой стрелки как показано на следующем рисунке. Для граней это означает, что φ соответствует направлению грани вниз.

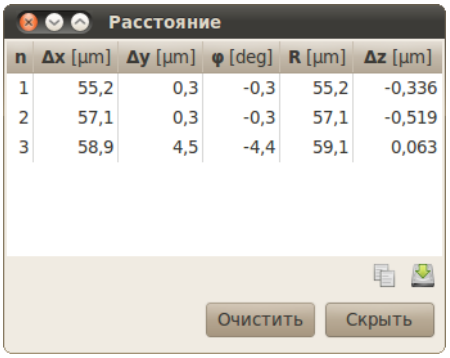


Положение грани поверхности (показана синим) измеряется как отсчитываемый против часовой стрелки угол между осью x и проекцией вектора нормали грани $\mathbf{n}$ на плоскость xy.

Инструмент расстояний

Расстояния и разности значений можно измерять с помощью инструмента расстояние. Он показывает горизонтальное (Δx), вертикальное (Δy) расстояния и общее расстояние по плоскости (R); азимут φ (измеряется так же, как наклон φ) и разницу значений конечных точек Δz для набора линий выбранных для текущих данных.

Расстояния можно скопировать в буфер обмена или сохранить в текстовый файл с помощью кнопок под списком.



Инструмент измерения расстояний с тремя выбранными линиями.

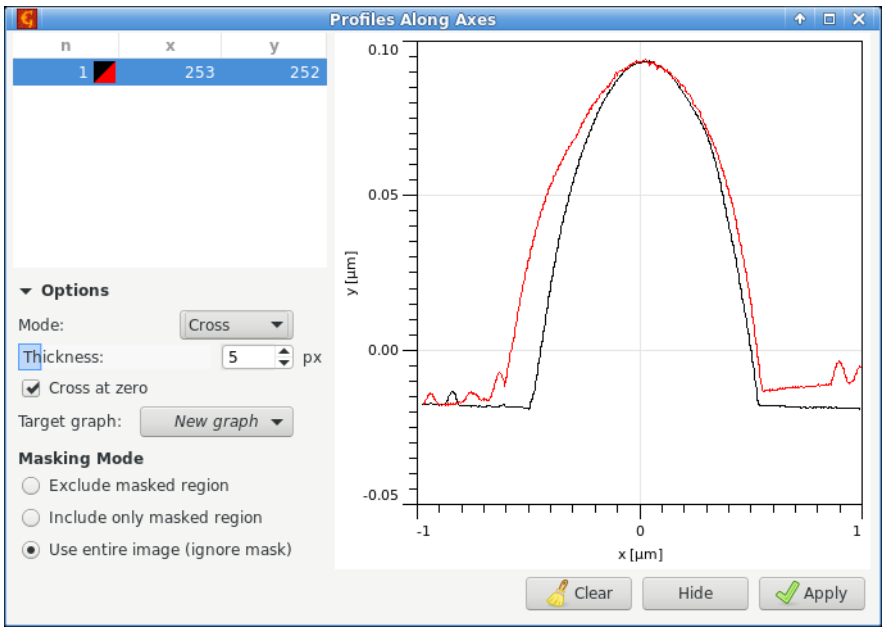
Профиль вдоль осей

Инструмент извлечения профилей вдоль осей извлекает линии сканирования вдоль горизонтального и/или вертикального направления. Направление управляется опцией режим, которая может быть задана как варианты горизонтальный, вертикальный или крестовой. В режиме креста оба профиля извлекаются одновременно.

Когда включена опция Пересечение в нуле , значения начала координат профиля смещается в точку пересечения (или в засечку на горизонтальном или вертикальном профиле). Это может оказаться полезным для выравнивания профилей на графике. Когда эта опция выключена, координаты профилей соответствуют координатам изображения вдоль заданных направлений.

Профили могут быть различной «толщины», что означает, что несколько линий сканирования вокруг выбранной будут усредняться. Это может пригодиться для подавления шума при измерении объектов правильной формы. Ширина профиля обозначается засечками на конце линии профиля на изображении.

Линии сканирования нескольких изображений могут одновременно читаться с помощью опции Множественный профиль.

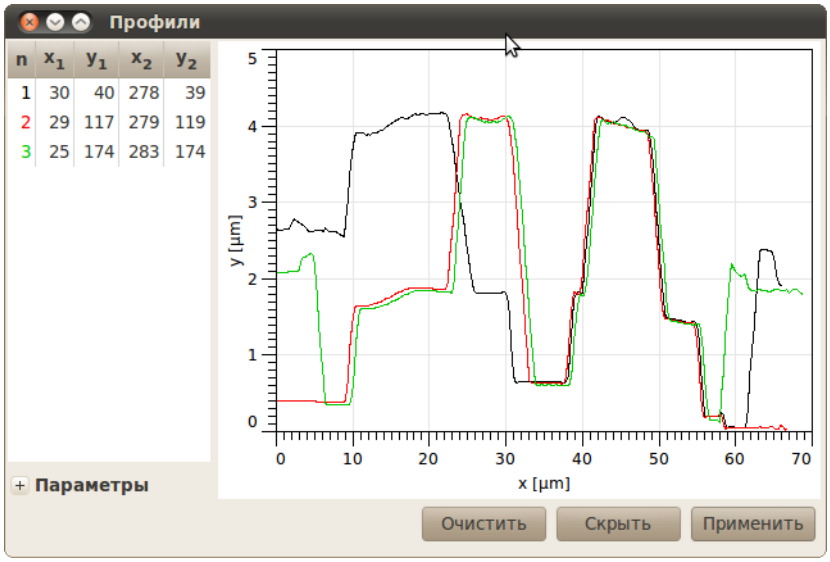


Инструмент извлечения профилей вдоль осей с горизонтальным и вертикальным профилями, пересекающимися в нуле, и раскрытыми настройками.

Извлечение профиля

Инструмент извлечения профиля извлекает профили вдоль произвольных линий, нарисованных и настроенных с помощью мыши в окне изображения, и показываемых в виде живого предварительного результата в диалоговом окне. Профили могут быть различной «толщины», что означает что больше соседних точек данных в направлении поперёк направления профиля будет использоваться для расчёта одной точки профиля для получения более широких профилей. Это может быть весьма полезно для уменьшения шума при измерении объектов правильной формы. Ширина профиля обозначается концевыми маркерами линии на изображении.

После того, как профили выбраны, их можно извлечь в виде графиков (как отдельных, так и сгруппированных в одном окне графика), которые в свою очередь могут быть проанализированы соответствующими функциями работы с графиками.



Инструмент извлечения профилей с тремя извлеченными профилями и раскрытыми настройками.

Кривая профиля строится по данным, выбираемыми через регулярные интервалы вдоль выбранной линии. Значения в точках, которые не попадают точно в центр пикселя (что обычно случается с наклонными линиями) интерполируются с использованием выбранного режима интерполяции. Если не задано определённое число точек с помощью опции Фикс. разр., число точек соответствует длине линии в пикселях. Это означает, что для полностью горизонтальных и вертикальных линий интерполяция не используется.

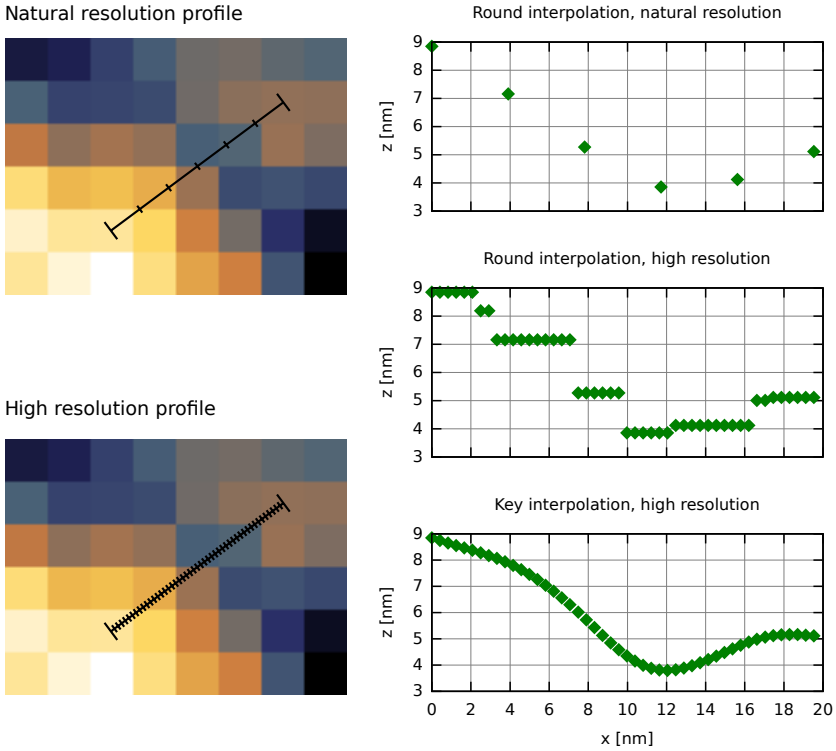


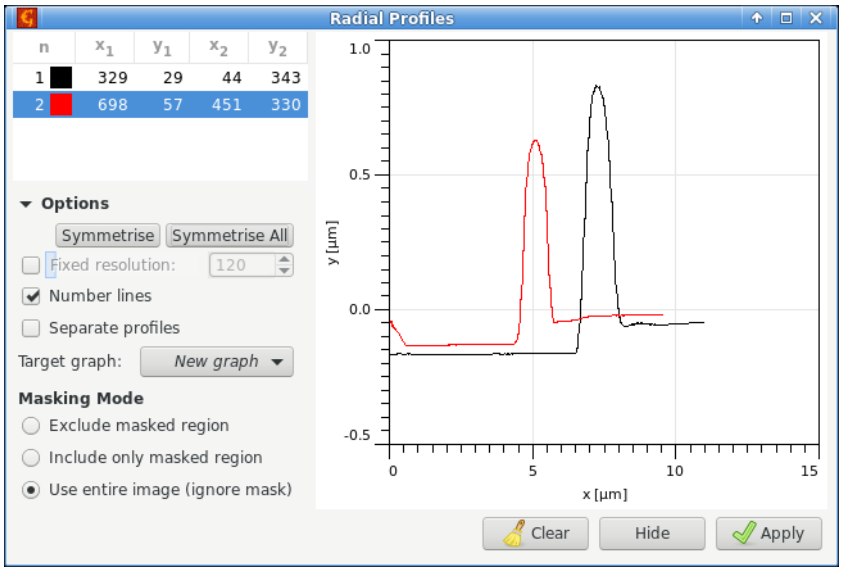
Иллюстрация выборки данных при извлечении профиля для наклонных линий. Схемы слева показывают точки вдоль линии где считываются данные для естественного и очень высокого разрешения. Графики справа показывают извлечённые значения. Сравнение естественного профиля и профиля высокого разрешения снятых с интерполяцией округлением показывает, что действительно точки данных кривой с естественным разрешением образуют подмножество точек профиля высокого разрешения. Влияние метода интерполяции на значения данных вне узлов сетки показано на нижних двух графиках, сравнивающих интерполяцию округлением и бикубическую при высоком разрешении.

В измерении профилей поперёк кромок и ступеней нередко важно выбрать направление профиля перпендикулярным грани. Кнопки Улучшить направление и Улучшить все могут помочь с этим. Первая пытается улучшить перпендикулярность редактируемой сейчас линии, в то время как вторая улучшает все выбранные линии. Центры линий при этом сохраняются, подстраиваются только направления профилей. Автоматическое улучшение не всегда безотказно, но обычно хорошо работает на достаточно явных отдельных кромках.

Радиальные профили

Инструмент Извлечения радиального профиляпохож на инструмент извлечения обычного. Однако, вместо извлечения профиля вдоль линий, он извлекает профиль из круговой области с центром, отмеченным засечкой на линии. Извлекаемый профиль затем рассчитывается усреднением по углу. Это можно использовать для извлечения формы симметричных объектов на изображении. Ось абсцисс извлекаемого графика будет расстоянием от центра вместо расстояния вдоль линии профиля.

Хотя линия может быть настроена вручную, нахождение таким образом наилучшего центра радиального профиля может оказаться непростой задачей. Вследствие этого, данный инструмент может точно определить положение наилучшего центра самостоятельно. Для этого нужно приблизительно выбрать желаемую линию профиля и затем нажать кнопку Сделать симметричным чтобы настроить редактируемую в настоящий момент линию или Сделать симметричным все для точной настройки всех линий. Линии будут слегка сдвинуты чтобы минимизировать разницу между линейными профилями, взятыми в различных направлениях от центра.



Инструмент извлечения радиальных профилей с двумя извлеченными профилями и раскрытыми настройками.

Преобразование в другие типы данных

Функция Обработка данных → Базовые действия → Придать объём создаёт объёмные данные из изображения. Поле высот интерпретируется как поверхность твёрдого объекта, как принято в АСМ. Воксели ниже поверхности (внутри материала) заполняются единицами, воксели выше поверхности (снаружи) нулями. Координата z объёмных данных соответствует единицам измерения данных изображения, значения для объёмных данных будут без единиц измерения.

Функция Обработка данных → Базовые действия → Превратить слои в объём создаёт объёмные данные из последовательности изображений. Все изображения в файле должны иметь одинаковые пространственные размеры и единицы измерения. Они интерпретируются как плоскости объёмных данных, которые создаются упаковкой изображений последовательно друг за другом. Координата z для объёмных данных следовательно соответствует номеру плоскости в последовательности (и может быть задана в диалоговом окне), в то время, как значения данных для блока объёмных данных будут иметь те же единицы измерения, что и исходные изображения.

Функция Обработка данных → Базовые действия → Преобразовать в XYZ создаёт блок данных XYZ из изображения. Каждый пиксель изображения соответствует одной точке в создаваемом блоке данных XYZ. Следовательно, координаты xy формируют правильную сетку и все единицы измерения будут соответствовать изображению.

Функция Обработка данных → Базовые действия → XYZ из каналов создаёт блок данных XYZ из трёх изображений, одного содержащего координаты x, одногоу и одного z. Это полезно в том случае, сели данные измерялись номинально на правильной сетке, но действительные точки измерений отличаются от точек правильной сетки и их координаты записаны в дополнительных каналах.

4.2 Интерполяция

Большинство геометрических преобразований, таких, как поворот, масштабирование или компенсация дрейфа используют интерполяцию или или их результат зависит от выбора типа интерполяции данных. Также некоторые другие операции, например, извлечение профилей, могут работать со значениями между отдельными пикселями и, следовательно, использовать интерполяцию. Поскольку данные СЗМ снимаются в относительно редко расположенных точках по сравнению с измеряемыми особенностями изображения (полные изображения обычно содержат всего лишь сотни пикселей в высоту и ширину), используемые методы интерполяции могут стать критичными для правильного количественного анализа свойств данных. В Gwyddion реализовано несколько методов интерполяции [1] и в большинстве модулей, где интерполяция требуется, можно выбрать используемый метод.

Здесь мы описываем принципы и свойства методов одномерной интерполяции. Все реализованные методы двумерной интерполяции поддерживают разделение переменных и, следовательно, сводятся к соответствующим методам одномерной интерполяции. В настоящий момент доступны следующие методы интерполяции:

Округление Интерполяция округлением (также называемая интерполяцией до ближайшего соседнего) – простейший метод, значения текущего местоположения округляются до целых и, таким образом, определяется ближайшее значение в точке с целыми координатами. Её степень многочлена = 0, регулярность C^{-1} и порядок 1.

Линейная Линейная интерполяция между двумя ближайшими значениями. Значение z в точке с относительными координатами x получается с помощью уравнения

$$z = (1-x)z_0 + xz_1$$

где z_0 и z_1 - значения в предыдущей и следующей точке, соответственно. Степень многочлена 1, регулярность C^0, порядок 2. Она идентична B-сплайну второго порядка.

Кубическая Кубическая интерполяция (точнее интерполяция Кея (Key) с $a = -1/2$ который имеет наиболее высокий порядок интерполяции) также использует значения в точках перед предыдущей и после следующей z_{-1} и z_2, соответственно. Другими словами оно имеет носитель длины 4. Значение затем получается по формуле

$$z = w_{-1}z_{-1} + w_0z_0 + w_1z_1 + w_2z_2$$

где

$$\begin{aligned} w_{-1} &= \left(-\tfrac{1}{2} + (1-\tfrac{x}{2})x\right)x \\ w_0 &= 1 + (-\tfrac{5}{2} + \tfrac{3}{2}x)x^2 \\ w_1 &= \left(\tfrac{1}{2} + (2-\tfrac{3}{2}x)x\right)x \\ w_2 &= (-\tfrac{1}{2} + \tfrac{x}{2})x^2 \end{aligned}$$

- веса интерполяции. Степень интерполяции Кея равна 3, регулярность C^1 и порядок 3.

по Шауму Интерполяция по Шауму (точнее, интерполяция Шаума четвёртого порядка) также имеет носитель длины 4. Веса интерполяции -

$$\begin{aligned} w_{-1} &= -\tfrac{1}{6}x(x-1)(x-2) \\ w_0 &= \tfrac{1}{2}(x^2-1)(x-2) \\ w_1 &= -\tfrac{1}{2}x(x+1)(x-2) \\ w_2 &= \tfrac{1}{6}x(x^2-1) \end{aligned}$$

Степень полинома 3, регулярность C^0 и порядок 4.

АБС Аппроксимация ближайшим соседом снова рассчитывается из ближайших четырёх значений данных, но, в отличие от остальных, не является кусочно полиномиальной. Веса интерполяции:

$$w_k = \frac{\frac{1}{r_k^4}}{\sum\limits_{j=-1}^{2} \frac{1}{r_j^4}},$$

для $k = -1, 0, 1, 2$, где $r_{-1} = 1+x$, $r_0 = x$, $r_1 = 1-x$, $r_2 = 2-x$. Её порядок = 1.

B-сплайн Веса -

$$\begin{aligned} w_{-1} &= \tfrac{1}{6}(1-x)^3 \\ w_0 &= \tfrac{2}{3} - x^2(1-\tfrac{x}{2}) \\ w_1 &= \tfrac{1}{6} + \tfrac{1}{2}x\big(1 + x(1-x)\big) \\ w_2 &= \tfrac{1}{6}x^3 \end{aligned}$$

Однако, они применяются не напрямую к значениям функции, как выше, а к коэффициентам интерполяции, рассчитанным из значений функции [1]. Степень полинома 3, регулярность C^2 и порядок 4.

O-MOMS Веса интерполяции:

$$\begin{aligned} w_{-1} &= \tfrac{4}{21} + \left(-\tfrac{11}{21} + (\tfrac{1}{2} - \tfrac{x}{6})x\right)x \\ w_0 &= \tfrac{13}{21} + \left(\tfrac{1}{14} + (-1 + \tfrac{x}{2})x\right)x \\ w_1 &= \tfrac{4}{21} + \left(\tfrac{3}{7} + (\tfrac{1}{2} - \tfrac{x}{2})x\right)x \\ w_2 &= (\tfrac{1}{42} + \tfrac{1}{6}x^2)x \end{aligned}$$

Однако, они применяются не напрямую к значениям функции, как выше, а к коэффициентам интерполяции, рассчитанным из значений функции [1]. Степень полинома 3, регулярность C^0 и порядок 4.

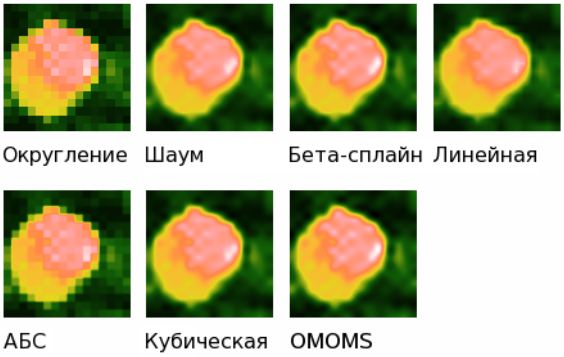


Иллюстрация доступных видов интерполяции (исходные пиксели очевидны на изображении результата интерполяции округлением). Все изображения имеют идентичные диапазоны псевдоцвета.

Источники

[1] P. Thévenaz, T. Blu, M. Unser: Interpolation revisited. IEEE Transactions on medical imaging 10 (2000) 739–758, doi:10.1109/42.875199

4.3 Выравнивание данных и вычитание фона

Выравнивание

Данные, полученные со сканирующих зондовых микроскопов нередко вообще никак не выровнены; микроскоп напрямую выводит сырые данные, пересчитанные из напряжения на пьезосканере, измерения деформации, данных интерферометра или другой системы детекции смещений. Такой способ экспорта данных позволяет выбрать пользователю его/её собственный метод выравнивания данных.

Выбор метода выравнивания должен быть основан на конфигурации вашего СЗМ. В основном, для систем с независимыми сканерами для каждой оси обычно достаточно вычета плоскости. Для систем со сканером/сканерами, двигающимися по всем трём осям (сканерами на пьезотрубке) нужно использовать выравнивание вычетом полинома второго порядка.

Разумеется, можно использовать выравнивание более высоких порядков для любых данных, однако, при этом могут быть утрачены реальные свойства поверхности (а именно её волнистость) и, следовательно, изменятся все статистические функции и величины, получаемые из анализа данной поверхности.

Исправить нуль и Обнулить среднее значение

Обработка данных → Выравнивание → Исправить нуль

Обработка данных → Выравнивание → Обнулить среднее значение

Простейшие функции, связанные с выравниванием данных это Исправить нуль и Обнулить среднее значение, которые просто добавляют постоянное значение ко всем элементам поля данных чтобы переместить, соответственно, минимум или среднее значение в нуль.

Выравнивание плоскости

Обработка данных → Выравнивание → Выровнять плоскость

Выравнивание плоскости обычно является одной из первых функций, применяемых к необработанным данным СЗМ. Плоскость рассчитывается по всем точкам изображения и затем вычитается из данных.

Если на изображение наложена маска, выравнивание плоскости предлагает или использовать данные под маской для аппроксимации плоскостью, или исключить данные под маской, или игнорировать маску и использовать полный набор данных.

Подсказка Можно быстро применить выравнивание плоскости щелчком правой кнопкой мыши на окно изображения и выбором Выравнивание.

Инструмент выравнивания по трём точкам

Инструмент выравнивание по трём точкам можно использовать для выравнивания очень сложных структур поверхности. Пользователь просто выбирает три точки на изображении, которые должны быть на одном уровне, и затем нажимает Применить. Плоскость рассчитывается по этим трём точкам и вычитается из данных.

Выравнивание граней

Обработка данных → Выравнивание → Выравнивание граней

Выравнивание граней выравнивает данные вычетом плоскости подобно обычной функции Выравнивание плоскости. Однако, плоскость определяется по другому: она пытается сделать грани на поверхности максимально горизонтальными. Таким образом, для поверхностей с большими горизонтальными областями, это ведёт к гораздо лучшим результатам, чем обычное выравнивание плоскостью, особенно если на поверхности присутствуют крупные объекты.

С другой стороны, оно не всегда подходит для некоторых типов поверхностей. Сюда входят случайные поверхности. данные с заметным тонким шумом и нетопографичекие изображения поскольку метод не работает нормально если характерные пространственные размеры и «высоты» различаются на много порядков.

Подобно выравниванию плоскостью, выравнивание граней может включать или исключать данные под маской. Этот выбор предоставляется только если маска есть.

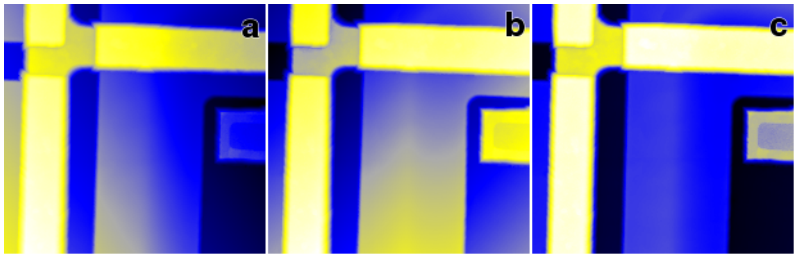
Определение ориентации граней — итерационный процесс, работающий следующим образом. Вначале определяется разброс значений локальных нормалей:

$$\beta^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{n}_i^2$$

где $\mathbf{n}_i$ — вектор нормали к локальной грани (см. координаты наклонов) в i-том пикселе. Затем преобладающая нормаль оценивается как

$$\mathbf{n} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\mathbf{n}_i \exp\left(-c\frac{\mathbf{n}_i^2}{\beta^2}\right)}{\sum_{i=1}^{N}\exp\left(-c\frac{\mathbf{n}_i^2}{\beta^2}\right)}$$

где $c = 1/20$ — константа. Далее плоскость, соответствующая преобладающей нормали $\mathbf{n}$, вычитается и все три шага повторяются, пока процесс не сойдётся. Гауссовы факторы веса служат для выбора одного набора подобных нормалей к локальным граням и сходимости к их среднему направлению. Без этих факторов процедура очевидно сойдётся за один шаг к общей средней нормали и, следовательно, будет полностью эквивалентна обычному выравниванию плоскостью.



Пример выравнивания граней: (a) нескорректированные данные с наклоном; (b) данные, выровненные стандартным вычетом плоскости (Выравнивание плоскости); (c) данные, выровненные выравниванием граней.

Выравнивание поворотом

Обработка данных → Выравнивание → Выравнивание поворотом

Выравнивание поворотом ведёт себя подобно Выравниванию плоскостью, однако, в данном случае аппроксимирующая плоскость не вычитается просто из данных. Вместо этого, этот модуль берёт параметры аппроксимирующей плоскости и поворачивает данные изображения на вычисленную величину таким образом, чтобы данные лежали в плоскости. Таким образом, в отличие от выравнивания плоскостью, этот модуль сохраняет данные об углах на изображении.

Вычет фона

Gwyddion содержит несколько специальных модулей для вычета фона. Все они позволяют извлечь вычитаемый фон в отдельное окно данных.

Подсказка Для более тонкого контроля можно использовать любой из инструментов фильтрации Gwyddion на изображении и затем применить модуль Арифметики данных чтобы вычесть результат из оригинального изображения.

Полиномиальный фон

Обработка данных → Выравнивание → Полиномиальный фон

Аппроксимирует данные полиномом заданного порядка и вычитает этот полином. В режиме Независимые степени порядки для полиномов по горизонтали и вертикали могут быть в общем случае заданы различными, т.е. аппроксимирующий полином будет

$$\sum_{j=0}^{m}\sum_{k=0}^{n} a_{j,k}x^j y^k$$

где m и n выбранные степени полиномов по горизонтали и вертикали, соответственно. В режиме Ограниченная общая степень аппроксимирующий полином будет

$$\sum_{j+k\leq n} a_{j,k}x^j y^k$$

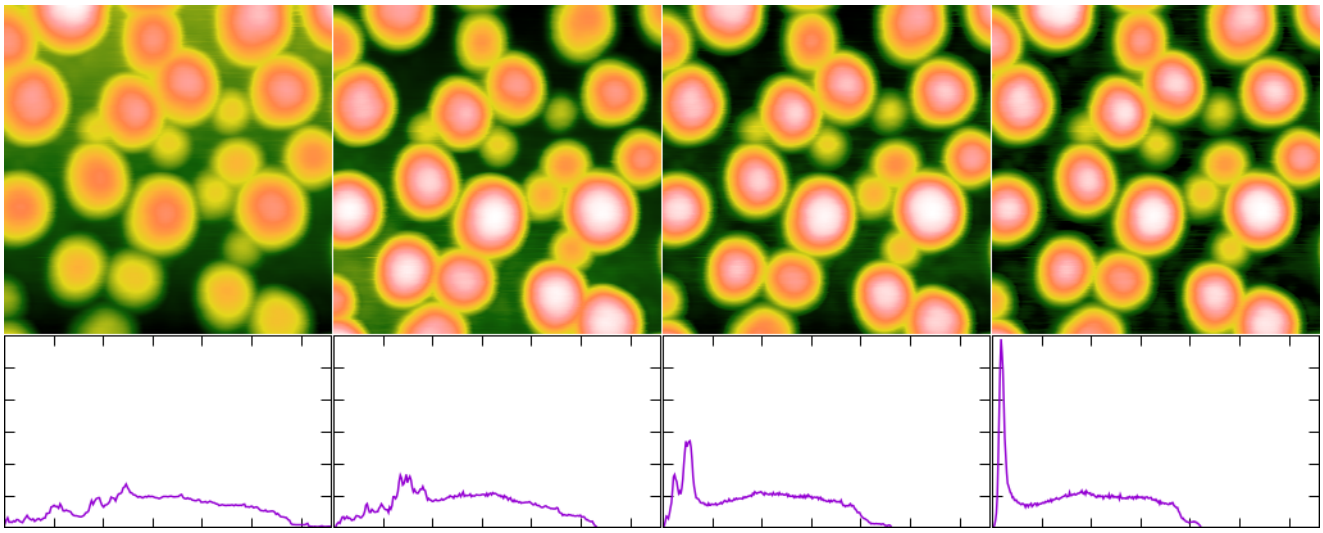
где n — выбранная общая степень.

Подобно выравниванию плоскостью, вычитание полиномиального фона может включать или исключать данные под маской. Этот выбор предоставляется только если маска есть.

Выровнять основание

Обработка данных → Выравнивание → Выровнять основание

Когда на плоском основании поверхности присутствует некоторое количество больших выступающих частей можно использовать маску выступающих частей и затем выравнивание плоскостью, выравнивание граней и/или полиномиальное выравнивание для правильного выравнивания плоскости основания. Это может, однако, потребовать нескольких шагов и подбора параметров методом проб и ошибок. Команда Выровнять основание пытается выполнить такое выравнивание автоматически используя комбинацию выравнивания граней и полиномиального вместе с автоматическим выбором маски. Она пытается максимально оптимизировать остроту пика функции распределения высот, соответствующую плоской базовой поверхности.



Пример применения команды выравнивания основания: исходное изображение, изображение, выровненное с помощью выравнивания граней, выравнивания плоскости, выровненное с помощью функции выровнять основание. Исходное изображение показано с линейной шкалой псевдоцвета, выровненные с адаптивной шкалой псевдоцвета. График под каждым из изображений показывает соответствующее ему распределение высоты (с одинаковыми диапазонами осей).

Вращение дуги

Обработка данных → Выравнивание → Вращение дуги

Данные выравниваются вращением виртуальной «дуги» заданного радиуса горизонтально или вертикально над (или под) данными. Огибающая этой дуги считается фоном, что ведёт к удалению деталей больше, чем радиус дуги (примерно). Также возможно применить выравнивание в обоих направлениях, в этом случае дуга сначала движется горизонтально, затем вертикально.

По умолчанию дуга вращается на нижней стороне, сохраняя положительные выступающие области (пики). Также возможно вращать её на верхней стороне включением опции Инвертировать высоту.

Вращение сферы

Обработка данных → Выравнивание → Вращение сферы

Данные выравниваются вращением виртуальной «сферы» заданного радиуса горизонтально или вертикально над (или под) данными. Огибающая этой сферы считается фоном, что ведёт к удалению деталей примерно больше, чем радиус сферы (примерно).

Медианное выравнивание

Обработка данных → Выравнивание → Выровнять по срединному

Операция выравнивания медианой фильтрует данные медианным фильтром с большим ядром и считает результат фоном. Только детали меньше, чем приблизительно размер ядра останутся на изображении.

Усечённое среднее

Обработка данных → Выравнивание → Усечённое среднее

Более общий вариант Медианного выравнивания это фильтр усечённого среднего. В усечённом среднем заданные доли наименьших и наибольших значений отбрасываются и затем оставшиеся данные усредняются. Если данные не отбрасываются то фильтр эквивалентен фильтру среднего, в то время, как в случае максимального количества отбрасываемых (симметрично) значений он становится медианным фильтром. Количество отбрасываемых значений может задаваться долей (перцентилем) или заданным числом.

Фильтр К-того ранга

Обработка данных → Интегральные преобразования → Фильтр ранга

Другая операция, которая обобщает Медианное выравнивание это фильтр К-того ранга. Представляя все пиксели в окрестности заданного отсортированными, медианный фильтр выбирает значение точно по центру. Фильтр К-того ранга позволяет задать любой другой ранг или перцентиль как результат работы фильтра.

Это означает что данный фильтр может воспроизводить фильтры минимума, максимума и срединного – и любой промежуточный вариант. Он также может напрямую рассчитывать результат выполнения двух фильтров ранга одновременно и разницу между ними. Это бесполезно для выравнивания, но позволяет, например, расчёт локального межквартильного диапазона для каждого пикселя.

4.4 Маски

Функции, связанные с масками, можно разделить на три основные группы:

Создание Маски создаются с помощью различных типов функций выделения, а именно функций выделения зёрен (Пометить по порогу, Пометить по водоразделу), функций выделения дефектов (Маска выпадающего, Пометить царапины) и функций выделения выдающихся частей (Маска по корреляции, Анализ граней, Карта достоверности). В дополнение, некоторые основные функции редактирования маски позволяют создать их с нуля.

Маски также используются чтобы пометить неправильные пиксели в файлах, импортированных из форматов, которые делают различие между правильными и неправильными пикселями, поскольку Gwyddion не поддерживает концепцию неправильных пикселей.

Применение В общем случае, область под маской считается интересующей областью, т.е. той областью, над которой будут производиться операции. Это применимо, в частности, к статистическим функциям, таким как Инструмент статистических величин. Функция Интерполировать данные под маской заменяет данные под маской, в то время, как Инструмент удаления зёрен может производить подобную замену для отдельных зёрен. Доступен ряд функций для изучения свойств отдельных зёрен, см. раздел статистика зёрен.

Некоторые функции спрашивают, стоит ли рассматривать область под маской включенной или исключенной (или игнорировать маску), в частности, функции выравнивания. Такой выбор показывается только если маска присутствует на данных.

Редактирование Несколько основных операций с масками, таких как инверсия или полное удаление, доступно в меню Обработка данных → Маска. Более сложные функции, включая предназначенные для работы с зёрнами инструмент удаления зёрен и фильтр зёрен, которые предлагают различные способы удаления части маски, так же, как инструмент редактирования маски и пометить с помощью ориентированы на общее редактирование маски.

Этот раздел описывает общие функции работы с масками, которые не привязаны к конкретным применениям.

Основные операции

Инвертировать и удалить маску

Основные операции в меню Обработка данных → Маска включают в себя Инвертировать, которая инвертирует маску, делая отмеченные пиксели неотмеченными и наоборот, и Удалить, которая удаляет маску с поля данных. Эти функции также доступны из инструмента Редактор маски, описанного ниже. Также маску можно удалить используя контекстное меню окна данных.

Извлечь маску

Функция Извлечь создаёт новое изображение из маски поверх текущего изображения. Новое изображение будет иметь значения 1 в пикселях, отмеченных маской, и 0 в неотмеченных.

Сдвиг

Маску можно сдвигать горизонтально и/или вертикально используя опцию Обработка данных → Маска → Сдвиг. После сдвига маски, часть её пикселей перестаёт попадать в границы изображения. Опция Тип внешней части управляет тем, как они будут заполняться. Методы периодического, зеркального и копирования границы работают так же, как и в методе Расширить. В дополнение, все внешние пиксели могут быть установлены в пиксели под маской (Заполненный) или без маски (Пустой).

Распространить

Иногда полезно скопировать маску на несколько изображений сразу. Это можно сделать с помощью функции Распространить. Она может копировать маску либо на все изображения в одном файле, либо на все изображения во всех открытых файлах. Если установлен флажок сохранять имеющиеся маски, то функция не будет заменять маски там, где они уже есть. Следует отметить, что маска может быть скопирована только на изображения с таким же разрешением в пикселях. Следовательно, изображения с другими размерами автоматически исключаются.

Инструмент редактирования маски

Инструмент Редактор маски — «швейцарский нож» для изменения маски. Он реализует две группы функций: редактирование маски рисованием непосредственно в окне данных и глобальные операции над маской, такие как инверсия, увеличение и сжатие маски.

Непосредственное изменение маски управляется кнопками в группе редактор. Оно может осуществляться двумя способами: выбором геометрических фигур, которые последовательно заполняются или удаляются (используя опцию Формы, и свободным рисованием с помощью инструментов рисования (опция Инструменты рисования).

Кнопки в ряду Режим выбирают, как нарисованная в окне данных геометрическая фигура будет изменять маску:

Установить Создаётся новая маска в виде нарисованной фигуры, убирая любую уже имеющуюся маску.

Добавить Маска расширяется нарисованной фигурой (если маски не было, она создаётся).

Вычесть Нарисованная фигура вырезается из маски. Функция ничего не делает если маски нет.

Пересечь Маска устанавливается в пересечение нарисованной фигуры и уже имеющейся маски. Функция ничего не делает если маски нет.

Кнопки в ряду Форма контролируют форму изображаемой на маске фигуры. Можно выбрать прямоугольники, эллипсы и тонкие линии.

Инструменты свободного рисования выбираются кнопками в ряду инструмент:

Карандаш Свободное рисование карандашом с радиусом, заданным параметром Радиус. Может быть медленным на небыстрых компьютерах и/или больших областях данных.

Стёрка Свободное стирание ластиком с радиусом, заданным параметром Радиус. Может быть медленным на небыстрых компьютерах и/или больших областях данных.

Заполнить Заливка непрерывной пустой области.

Заполнить не маской Удаление заливки непрерывной области под маской.

Основные глобальные операции с масками, т.е. инверсия, удаление и заполнение всей области данных маской доступны в ряду Действия. Дополнительные операции включают в себя:

Увеличить Расширяет маску на количество пикселей с каждой стороны. Точнее маска расширяется на один пиксель с каждой стороны и это повторяется количество раз.

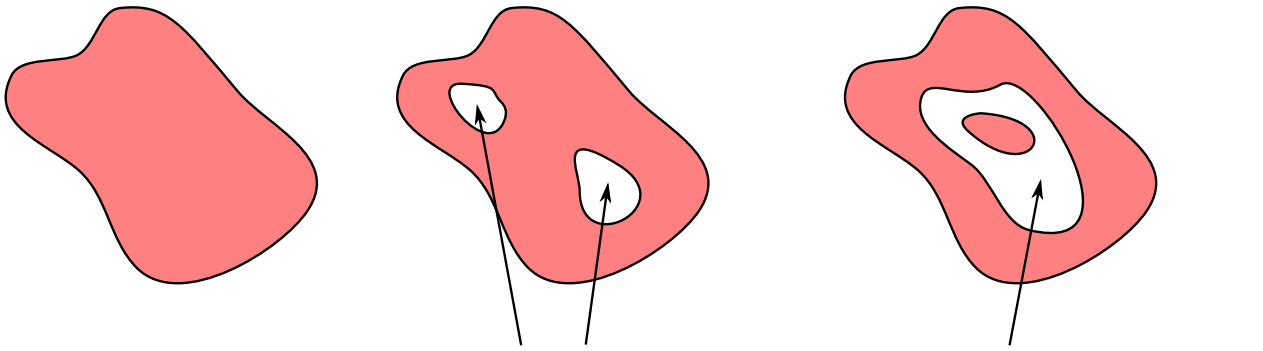
Обычно расширение не различает отдельные части маски. При этом части, которые выросли настолько, что соединились друг с другом, сливаются. Это можно предотвратить с помощью выбора опции Предотвращать слияние зёрен при растяжении которая прекращает рост отдельных частей маски когда между ними остаётся зазор в один пиксель.

Когда маска расширяется на большую величину может стать важным каким образом измеряется расстояние от границы маски, поскольку оно будет определять форму, в виде которой будут расти малые зёрна. Это управляется опцией тип расстояния. Различные типы расстояний описаны в параграфе преобразование расстояния. Обычно предпочтительным является эвклидово расстояние.

Уменьшить Уменьшает маску на количество пикселей с каждой стороны. Точнее, маска уменьшается на один пиксель с каждой стороны и это повторяется количество раз.

Уменьшение может происходить, а может не происходить со стороны границ поля данных. Это управляется с помощью флажка Ужать от границы. Также как и для расширения, возможно задать тип расстояния также для уменьшения.

Заполнить пустоты Делает все зёрна односвязными, т.е. без пустот, заполняя пустоты в зёрнах. Флажок Заполнять не односвязные управляет будут ли заполняться только простые пустоты, т.е. те пустоты, которые сами являются односвязными, или будут заполняться любые пустоты независимо от их топологии.



Объяснение связности пустот для функции Заполнить пустоты. Без включенной опции Заполнить неодносвязные будут заполняться только пустоты в средней маске. С этой опцией будут заполняться все пустоты.

Пометить с помощью

Обработка данных → Маска → Пометить с помощью

Инструмент может создавать или изменять маски используя другие маски или данные того же разрешения. Операции, которые можно производить с текущей маской, те же самые, что и в инструменте редактирования маски: создание, объединение, вычитание, пересечение. Источник другой маски может быть одним из следующих:

Маска Это наиболее простой случай, маска может комбинироваться с другой с использованием заданных логических операций.

Данные В режиме данных, другое поле высот используется как источник другой маски. Маска состоит из пикселей, попадающих в диапазон высот, заданный как относительные значения от полного диапазона. Чтобы использовать пиксели, не попадающие в определённый диапазон, для маскирования, установите верхнюю границу меньше, чем нижнюю.

Презентация Режим презентации отличается от режима данных только тем, что используется презентация вместо данных.

Это является исключением из правила, что презентации никогда не используются для дальнейшей обработки. Иногда оказывается полезно пометить, например, края, обнаруженные на данных, даже если соответствующая презентация показывает дикую с физической точки зрения величину.

Морфологическая операция

Классические морфологические операции можно производить над маской используя меню Обработка данных → Маска → Морфологическая операция. Все операции берут маску как первый операнд и так называемый структурирующий элемент как второй операнд, который определяет точный вид воздействия. Структурирующий элемент может быть выбран из нескольких предопределённых форм (диск, восьмигранник, квадрат, бриллиант) или может быть задан другой маской.

Все основные формы являются симметричными. Если в качестве структурирующего элемента используется другая маска, она может быть асимметричной или иметь пустые границы. В этом случае структурирующий элемент будет иметь полные размеры выбранного изображения маски, включая любую пустую границу. Это полноразмерное изображение считается центрированным. Если нужно убрать пустые границы с маски структурирующего элемента, используйте опцию Подрезать пустые границы. Структурирующий элемент будет снова отцентрован, но уже после удаления пустых границ.

Доступные операции включают в себя:

Эрозия Эрозия удаляет малые особенности и уменьшает размер больших областей – на величину и в виде формы заданной структурирующим элементом. Точнее, если структурирующий элемент помещён в пиксель маски и целиком содержится внутри маски, то этот пиксель останется под маской. Все остальные пиксели маски будут очищены.

Расширение Расширение заполняет малые полости и увеличивает размер выделенных областей – на величину и в виде формы заданной структурирующим элементом. Точнее, если структурирующий элемент повёрнут на угол 180 градусов и помещён в каждый пиксель маски, то результат расширения будет объединением всех этих структурирующих элементов с данными смещениями.

Размыкание Размыкание это последовательное применение эрозии после расширения. Расширение исправляет эффект предшествующей эрозии в тех точках, где маска совпадает со структурирующим элементом. Общим эффектом будет то, что малые несовпадающие выступы и зёрна будут удаляться, а совпадающие части будут оставаться в исходном виде. Форма маски при этом становится более чистой и простой.

Замыкание Замыкание это последовательное применение расширения после эрозии. Эрозия исправляет эффект предшествующего расширения в тех точках, где маска совпадает со структурирующим элементом. Общим эффектом будет то, что малые несовпадающие впадины и дыры будут удаляться, а совпадающие части будут оставаться в исходном виде. Форма маски при этом становится более простой.

Размыкание ASF Простой фильтр размыкания или замыкания может оказаться слишком грубым для исправления дефектов формы с варьирующимся размером. Переменный последовательный фильтр представляет собой последовательность операций замыкания и размыкания с пропорционально увеличивающимся до заданного размера структурирующим элементом. Он лучше сохраняет форму особенностей, которые не должны удаляться размыканием. Финальной операцией этого фильтра будет размыкание.

Замыкание ASF Простой фильтр размыкания или замыкания может оказаться слишком грубым для исправления дефектов формы с варьирующимся размером. Переменный последовательный фильтр представляет собой последовательность операций замыкания и размыкания с пропорционально увеличивающимся до заданного размера структурирующим элементом. Он лучше сохраняет форму особенностей, которые не должны удаляться замыканием. Финальной операцией этого фильтра будет замыкание.

Преобразование в расстояние

Преобразование расстояния присваивает каждому пикселю его расстояние до границы маски. Оно доступно из меню Обработка данных → Маска → Преобразование расстояния. Эта операция является в некотором роде дополнительной к операции водораздела. Преобразование расстояния может выполнять преобразование используя евклидово расстояние

$$\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$$

, а также классические простые определения расстояния, такие как городские кварталы (4-связное)

$$|x_1 - x_2| + |y_1 - y_2|$$

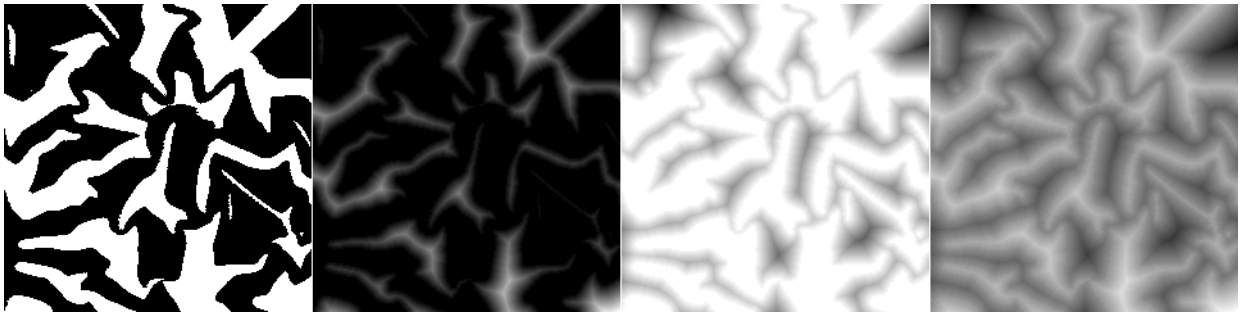
и шахматная доска (8-связное)

$$\max(|x_1 - x_2|, |y_1 - y_2|)$$

, которые полезны в основном в образовательных целях. В дополнение доступны октогональные расстояния, которые рассчитываются делая шаги по очереди по определению городских кварталов и шахматной доски, в результате получая варианты «48» и «84» в зависимости от того, какой шаг был сделан первым. И, наконец, доступно восьмистороннее расстояние без уточнения, которое является средним двух предыдущих вариантов.

Если оно применяется к внутренней части зёрен, расстояние равно нулю снаружи зерна и увеличивается по мере приближения к "центру" зерна. Оно может применяться наоборот, к внешней части по отношению к зёрнам и значение будет большим для наиболее удалённых от любого зерна пикселей. Также можно рассчитать знаковое двухстороннее преобразование, равное разности двух предыдущих, т.е. оно положительно внутри зерна и отрицательно снаружи.

Опция Ужать от границы управляет обработкой границ изображения. При включенной, границы изображения также рассматриваются как границы зёрен (или пустого пространства). Пиксели на краях изображения при этом не могут приобретать больших значений. При выключенной опции, зёрна (или пустое пространство) оказываются как-бы бесконечно большими вне изображения. И пиксели вблизи границы могут приобретать большие значения расстояния.

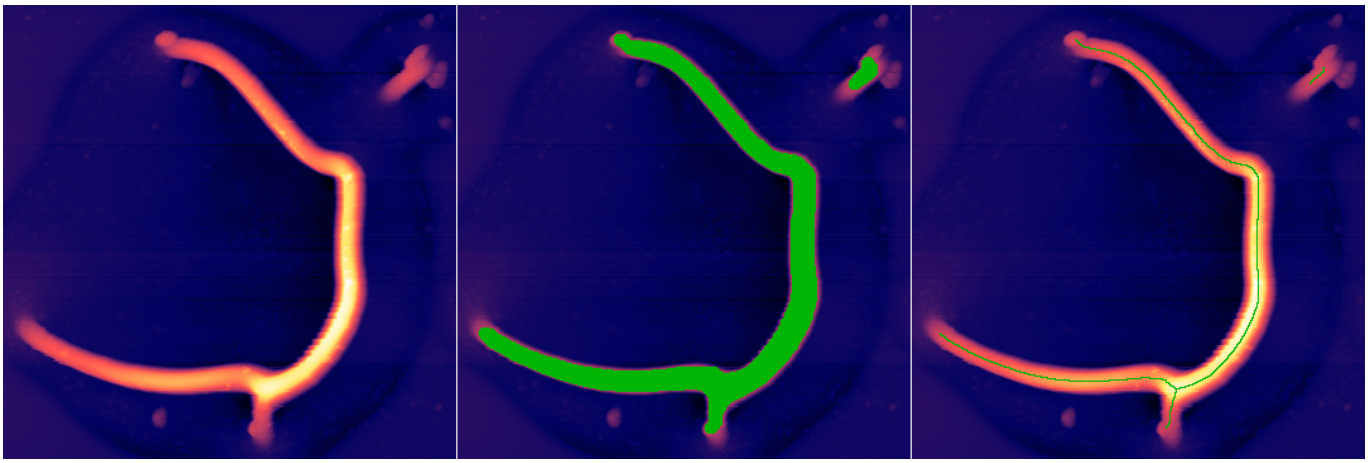


Пример преобразования в эвклидово расстояние: исходная маска показана белым по чёрному, внутреннее преобразование расстояния, внешнее (с перевёрнутой шкалой серого для сравнения) и преобразование со знаком.

Утоньшение

Утоньшение это ещё одна классическая морфологическая операция, доступная в меню Обработка данных → Маска → Тоньше. Она уменьшает маску до скелетной части, состоящей только из тонких линий, характеризующих общую форму. Если граница маски будет зазубренной, это будет приводить к большому числу дополнительных ответвлений. Следовательно, обычно более полезно применить предварительно упрощающую операцию (размыкание или замыкание).

Следует отметить, что данная функция работает только с маской. Она не использует никакой информации нижележащего поля данных. Следовательно, даже если маска после утоньшения нередко может совпадать с вершинами и гребнями выделенных топографических особенностей, обычно это просто совпадение.



Пример утоньшения маски: топографическое изображение коробления полимерной плёнки (слева); то же изображение с маской поверх выступа на поверхности (в центре); та же маска после утоньшения (справа).

Зашумление маски

Функция Обработка данных → Маска → Зашумление маски добавляет случайный шум вида соль и/или перец к маске, тип шума выбирается (симметричный, положительный, отрицательный). Этот модуль нужен в основном для тестирования и разработки методов обработки данных.

Параметр Плотность определяет долю пикселей изображения, задетых обработкой. Если включена опция Менять только границы пиксели маски не меняются, если они не принадлежат в настоящее время границе маски, т.е. некоторые из их четырёхсвязных соседей не отличаются от текущего пикселя.

4.5 Фильтры

Инструмент основные фильтры

Инструмент основные фильтры позволяет применить к вашему изображению несколько простых фильтров. Это может быть весьма полезно для удаления шума с данных; однако, реально измеренные данные изменяются в процессе применения фильтра, и требуется особая аккуратность чтобы не удалить с изображения важные детали.

Все фильтры меняют данные на основе значений в некоторой окрестности фильтруемого пикселя. Для некоторых фильтров размер и форма окрестности являются фиксированными. Для большинства, однако, размер может контролироваться параметром размер. Размер определяет диаметр окрестности для всех фильтров, кроме основанных на гауссовой функции (описанных ниже). Следовательно, рекомендуется использовать фильтры нечётного размера поскольку их действие будет симметричным.

Среднее значение Значение после фильтра это среднее значение точек окружения исходного пикселя.

Срединное значение Значение после фильтра это срединное значение точек окружения исходного пикселя.

Выборочная уборка шума Фильтр проверяет, не является ли значение экстремумом в окрестности. Значения, не являющиеся экстремумами, сохраняются. Значения экстремумов заменяются следующим наибольшим (наименьшим) значением.

Минимум Также известен как фильтр эрозии, заменяет значение минимальным в окрестности. Точнее, эрозия проводится с помощью плоского диска заданного диаметра.

Максимум Также известен как фильтр расширения, заменяет значение максимальным в окрестности. Точнее, расширение проводится с помощью плоского диска заданного диаметра.

Размыкание Фильтр размыкания – эрозия, за которой следует расширение. Положительные выступы при этом удаляются с поверхности, в то время как гладкие области и впадины в той или иной мере сохраняются.

Замыкание Фильтр замыкания – расширение, за которым следует эрозия. Отрицательные выступы при этом удаляются с поверхности, в то время как гладкие области и выступы в той или иной мере сохраняются.

ППФ размыкания Простой фильтр размыкания или замыкания может быть слишком грубым для коррекции дефектов переменного размера. Переменный последовательный фильтр (ППФ) состоит из последовательности операций замыкания и размыкания с последовательно увеличивающимся диском до заданного размера. Он лучше сохраняет форму особых деталей, которые не должны удаляться размыканием. Последней операцией фильтра является размыкание.

ППФ замыкания Переменный последовательный фильтр замыкания отличается от фильтра размыкания только порядком базовых операций. Последней операцией данного фильтра будет замыкание.

Кувахара Фильтр Кувахары – сохраняющий кромки сглаживающий фильтр.

Убрать "шахматную доску" Сглаживающий фильтр, специально предназначенный для удаления текстур, напоминающих шахматную доску, с изображений при сохранении других особенностей. Это фильтр свёртки с ядром

$$w_{\text{dechecker}} = \begin{pmatrix} 0 & 1/144 & -1/72 & 1/144 & 0 \\ 1/144 & -1/18 & 1/9 & -1/18 & 1/144 \\ -1/72 & 1/9 & 7/9 & 1/9 & -1/72 \\ 1/144 & -1/18 & 1/9 & -1/18 & 1/144 \\ 0 & 1/144 & -1/72 & 1/144 & 0 \end{pmatrix}$$

Гауссов Гауссов фильтр – сглаживающий фильтр, параметр размера определяет полную ширину на половинной высоте гауссовой кривой. Соотношение между полной шириной на половинной высоте и σ:

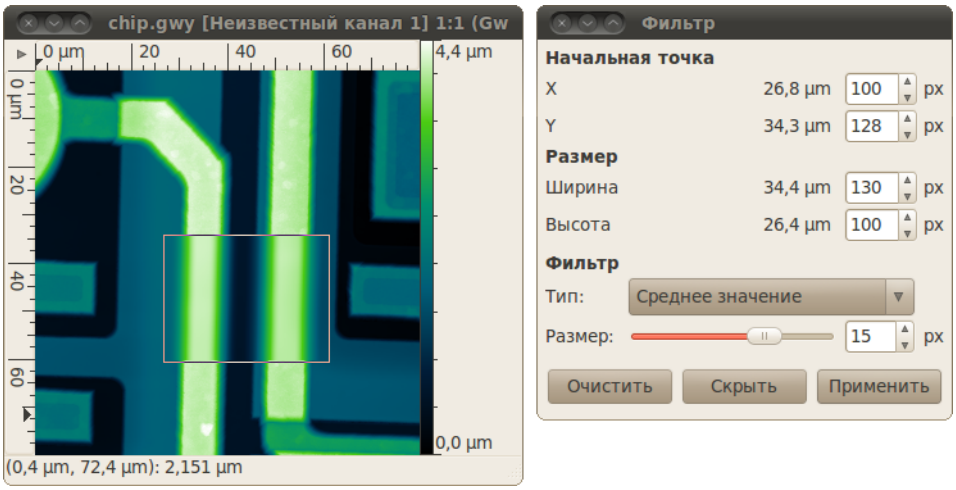
$$\text{FWHM} = 2\sqrt{2\ln 2}\,\sigma \approx 2.35482\sigma$$

Сделать резким Простая операция повышения контраста, которая является обратной гауссову фильтру. Сначала он дополнительно сглаживает изображение соответствующим гауссовым фильтром. Результат затем экстраполируется обратно чтобы получить оценку более резкого изображения.

По умолчанию, эти фильтры будут применяться ко всему изображению. Но можно применить фильтр к отдельной области, выбрав её мышью. Это может быть полезно для коррекции плохо промеренных областей в хорошем изображении.

Также можно ограничить область применения фильтра с помощью маски. В этом случае маска задаёт активные пиксели, значение которых будет изменяться фильтром. Пиксели в окрестности активной области могут по прежнему участвовать в расчёте пассивно, т.е. их значения будут влиять на результат.

Несколько основных фильтров можно использовать для простого удаления шума и дефектов. Дальнейшая работа с функциями выделения дефектов и их удаления описана в разделе редактирование данных, в качестве примера можно привести маску выпадающего и интерполировать данные под маской. Более продвинутые функции удаления шума в Gwyddion, например, удаление шума с помощью дискретного вейвлет-преобразования (DWT) и Фурье-фильтрации, описаны в разделе расширенное редактирование данных.



Снимок экрана инструмента фильтрации с применением фильтра среднего к прямоугольной выделенной области.

Фильтр свёртки

Обработка данных → Интегральные преобразования → Фильтр свёртки

Дискретные свёртки с произвольным ядром до 9×9 могут производиться используя фильтр свёртки (см. свёртку изображений для операции свёртки двух изображений).

Текстовое поле Делитель представляет собой общий множитель, на который делятся все коэффициенты перед применением фильтра. Это позволяет использовать ненормализованные коэффициенты, которые нередко представляются круглыми числами. Нормализация также может быть посчитана автоматически когда установлен флаг автоматически. Если сумма коэффициентов ненулевая, это делает фильтр сохраняющим сумму, т.е. она является множителем, который нормализует сумму коэффициентов к единице. Когда сумма коэффициентов равна нулю, автоматический фактор просто становится равным 1.

Поскольку многие практически используемые фильтры проявляют различные формы симметрии, коэффициенты могут быть автоматически дополнены в соответствии с выбранным типом симметрии (четные, нечетные). Дополнение происходит при нажатии Enter в поле ввода коэффициента.

Сразу после установки доступен только пример фильтра Identity (тождественность, он не слишком полезен, т.к. ничего не делает). этот фильтр не может быть изменён, чтобы создать новый используйте кнопку Новый на вкладке Предустановки.

4.6 Презентации

Модули презентаций не изменяют данные, вместо этого они выводят результат в отдельный слой, отображаемый поверх оригинальных данных. Прочие модули и инструменты работы с данными по прежнему будут оперировать

с нижележащими данными. Чтобы удалить презентацию нужно нажать правую кнопку мыши в окне данных и выбрать в появившемся меню Удалить презентацию.

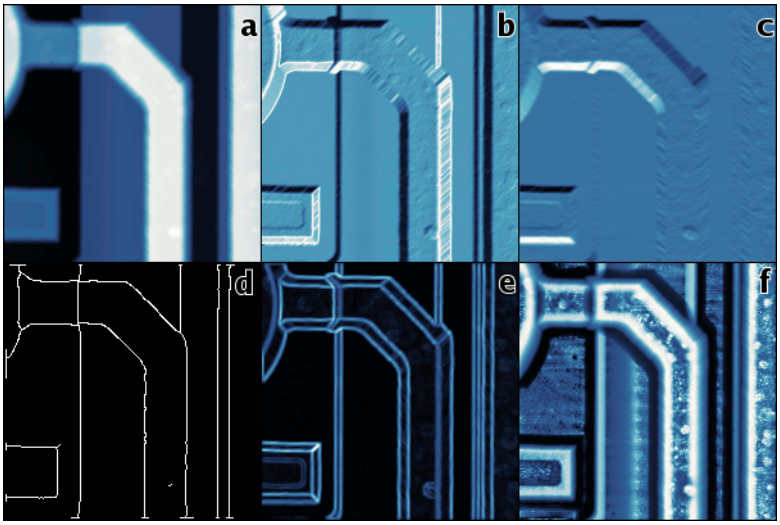
Основные операции

Меню Обработка данных → Презентация содержит несколько основных операций с презентациями:

Присоединить презентацию Присоединяет другое поле данных как презентацию к текущим данным. Следует отметить, что эта полезная функция иногда может вводить в заблуждение если пытаться получить нечто, основанное на данных, поскольку все расчётные значения получаются из нижележащих данных (а не из презентации, хоть она и выглядит как данные).

Удалить презентацию Удаляет презентацию из текущего окна данных. Этот вариант является альтернативой контекстного меню, доступного по щелчку правой кнопкой мыши в окне данных.

Извлечь презентацию Извлекает презентацию из текущего окна данных в новое изображение того же файла. Таким способом можно извлечь данные презентации для дальнейшей обработки. Следует отметить, однако, что извлекаемые данные не содержат информации о реальном масштабе, поскольку презентация нужна для визуализации определённых особенностей, но получаемым данным трудно или невозможно присвоить физический смысл. Следовательно, диапазоном значений нового канала всегда будет $[0, 1]$.



Примеры презентаций: (a) реальные данные, (b) затенение, (c) вертикальный градиент Превитта, (d) поиск краёв Канни, (e) поиск краёв по локальной нелинейности, (f) улучшение локального контраста.

Презентация затенения

Обработка данных → Презентация → Затенение

Простой и удобный способ увидеть данные как будто они освещаются с определённого направления. Направление может быть задано пользователем. Также возможно смешивать затенённое и исходное изображения для целей презентации. Разумеется, получающееся в результате изображение не имеет смысла с физической точки зрения.

Презентации выделения градиента

Обработка данных → Презентация → Градиент

Фильтры горизонтальных и вертикальных градиентов Собела и Превитта создают изображения, похожие на затемнение, однако, они выводят данные как результат свёртки данных с относительно стандартизованным ядром. Следовательно, они, например, могут использоваться для дальнейшей обработки презентаций. Ядра для горизонтальных фильтров приведены ниже, вертикальные ядра отличаются только отражением относительно главной диагонали.

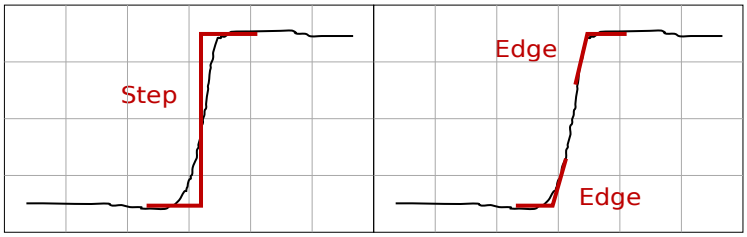
$$w_{\text{Prewitt}} = \begin{pmatrix} 1/3 & 0 & -1/3 \\ 1/3 & 0 & -1/3 \\ 1/3 & 0 & -1/3 \end{pmatrix}, \quad w_{\text{Sobel}} = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & -1/4 \\ 1/2 & 0 & -1/2 \\ 1/4 & 0 & -1/4 \end{pmatrix}$$

Презентации поиска края

Обработка данных → Презентация → Выделение края

Нередко возникает задача визуализации разрывов непрерывности, присутствующих на изображении, в частности, разрыв непрерывности значений (нулевого порядка) и непрерывности производных (первого порядка). Хотя методы обнаружения обоих называют методами «обнаружения края», они в реальности достаточно сильно отличаются, поэтому мы будем называть первые обнаружением ступеней и вторые как обнаружение края (кромки). Методы обнаружения более частных особенностей, т.е. углов, также широко используются, эти методы обычно относятся к нулевому порядку.

Порядок метода обнаружения разрывов непрерывности легко может быть виден на выводимом изображении. поскольку методы обнаружения краёв обычно дают типичные двойные линии на разрывах значений, как показано на следующем рисунке. В то время, как у идеальной ступеньки положения верхней и нижней кромки совпадают, данные реального мира имеют тенденцию содержать две отдельных кромки как показано на рисунке. Кроме того, нахождение двух кромок на ступеньке данных, даже на идеально острой, нередко является врождённой чертой методов обнаружения кромок.



Ступенька против кромки в одномерном мире.

В Gwyddion доступны следующие функции обнаружения ступеньки и кромки (последние являются в некоторой степени экспериментальными, с другой стороны обычно они дают лучшие результаты по сравнению с хорошо известными алгоритмами):

Канни Метод обнаружения края Канни – хорошо известный метод обнаружения ступеней и может быть использован чтобы извлекать изображения резких разрывов значений данных в виде тонких однопиксельных линий.

Лапласиан гауссианов Лапласиан представляет собой простую свёртку со следующим ядром (которая является пределом дискретного фильтра лапласиана гауссианов при $\sigma \to 0$):

$$w_{\text{laplace}} = \begin{pmatrix} 0 & 1/4 & 0 \\ 1/4 & -1 & 1/4 \\ 0 & 1/4 & 0 \end{pmatrix}$$

Пересечение нуля Алгоритм обнаружения края пересечением нуля помечает линии там, где результат фильтра лапласиана гауссианов меняет знак, т.е. пересекает ноль. Полуширина на половинной высоте гауссианов определяет уровень выделяемых деталей. Порог позволяет исключить смену знака со слишком малым абсолютным значением соседних пикселей, убирая мелкий шум. Следует заметить, однако, что для ненулевого порога линии краёв могут перестать быть непрерывными.

Ступень Алгоритм обнаружения ступеней обеспечивает хорошее разрешение, т.е. острые линии разрыва, и хороший динамический диапазон при этом будучи относительно нечувствителен к шуму. Принцип достаточно прост: он показывает квадратный корень разницы между квантилями $2/3$ и $1/3$ от значений данных в круговой окрестности радиусом в 2,5 пикселя с центром в каждом дискретном значении.

Гауссова ступень Гауссова ступень – настраиваемый фильтр, с балансом между точным отслеживанием ступеней и устойчивостью к шуму. Он имеет один настраиваемый параметр – ширину гауссовой функции (задаваемую как полная ширина на половине высоты). Узкие фильтры дают более тонкие линии, но также выделяют локальные дефекты. Широкие фильтры лучше отделяют ступени от других особенностей поверхности, но результат будет более размытым.

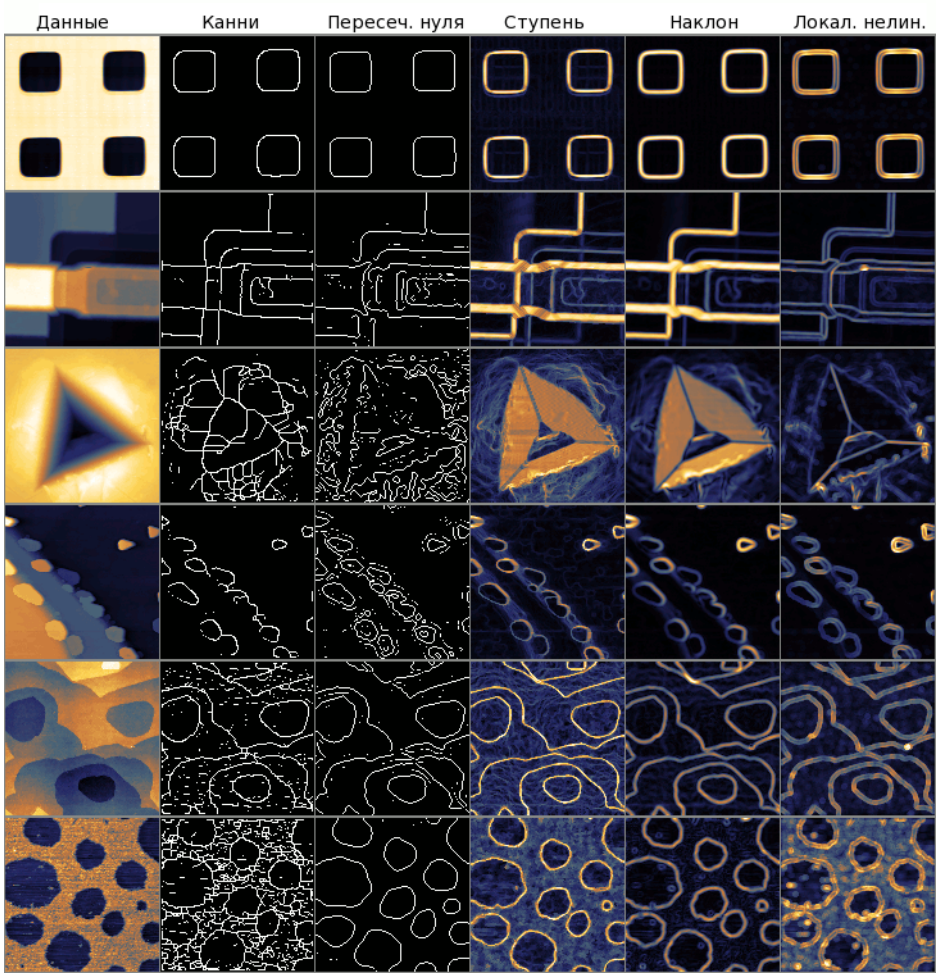
Фильтр работает путём расчёта свёртки изображения с ядрами, состоящими из гауссовой функции умноженной на функцию знака и повернутой чтобы покрывать различные направления. Результаты затем возводятся в квадрат и суммируются вместе.

Ср. квадр. Обнаружение ступеней показывает области с высоким локальным изменением значений. Рассчитывается и показывается среднеквадратичное отклонение от среднего значения в круговой окрестности радиуса 2,5 пикселя с центром в каждом дискретном значении.

Кромка среднеквадратичного отклонения Эта функция просто обрабатывает вывод среднеквадратичного отклонения фильтром, подобным лапласиану, чтобы усилить границы областей с большим локальным разбросом значений. Несмотря на имя это по прежнему средство обнаружения ступеней.

Локальная нелинейность Метод обнаружения края, который показывает локально сильно неплоские области. Он аппроксимирует плоскостью круговую окрестность радиусом в 2,5 пикселя с центром в каждом отсчёте и затем рассчитывает остаточную сумму квадратов аппроксимации, пересчитанную в наклон плоскости, т.е. делённую на $1+b_x^2+b_y^2$ где b_x и b_y – коэффициенты плоскости в направлениях x и y, соответственно. Затем отображается квадратный корень величины.

Наклон Показывает угол ϑ наклона локальной плоскости. Технически эта функция относится к детекторам ступени, однако. выделение ступеней на результате вывода не слишком сильное и она больше предназначена для легкого визуального сравнения различных наклонов, представленных на изображении.



Сравнение методов обнаружения ступеней и кромок на нескольких интересных или типичных примерах данных. Канни и пересечение нуля – детекторы ступеней, которые выводят линии края шириной в один пиксель, ступень и наклон – детекторы ступеней с непрерывным выводом, локальная нелинейность – детектор кромки, детектирование кромки легко можно наблюдать на втором и третьем ряду. Следует отметить, что пересечение нуля можно настраивать, его параметры подбирались чтобы получить вменяемый результат для каждого примера.

Локальный контраст

Обработка данных → Презентация → Локальный контраст

Метод для показа деталей в областях, где присутствует большое и малое изменение значений одновременно. Это достигается расчётом диапазона локального изменения значений, или разброса, вокруг каждого отсчёта данных и растягивание его таким образом, чтобы сделать этот разброс одинаковым для всех данных.

Ранг

Обработка данных → Презентация → Ранг

Альтернативный метод улучшения локального контраста. Это выравнивающий фильтр верхних частот, чем-то противоположный медианному фильтру. Каждое значение пикселя преобразуется в его ранг среди всех значений в определённой окрестности. Радиус окрестности задаётся параметром размер ядра.

В результате получается что все локальные максимумы приводятся к одному одинаковому максимальному значению, все локальные минимумы к одинаковому минимальному и все значения, не являющиеся ни максимумом, ни минимумом преобразуются к диапазону между ними, основанному на их ранге. Поскольку результат применения фильтра с радиусом r может содержать максимально $\pi(r+1/2)^2$ различных значений (приблизительно), фильтр также приводит к дискретизации значений, особенно для малых размеров ядра фильтра.

Логарифмический масштаб

Обработка данных → Презентация → Логарифмический масштаб

Логарифмический масштаб используется для презентации данных с помощью шкалы псевдоцвета.

Изображение РЭМ

Обработка данных → Презентация → Изображение РЭМ

Эта функция рисует на основе изображения топографии поверхности похожую на изображение РЭМ презентацию используя простейший возможный метод Монте-Карло. Для каждого пикселя поверхности выбирается некоторое количество отрезков, исходящих из этого пикселя со случайными направлениями и гауссовым распределением длин. Стандартное отклонение в распределении Гаусса управляется параметром радиус интегрирования. Если другой конец отрезка попадает в пустое пространство, яркость исходного пикселя увеличивается. Если он попадает внутрь материала, т.е. значение высоты оказывается ниже поверхности в конце отрезка, яркость уменьшается. Точнее, это описывает используемый метод Монте-Карло. Количеством отрезков можно управлять с помощью параметра качество. Эквивалентно, такое же значение интенсивности может быть рассчитано с помощью прямого интегрирования по всем пикселям в круговой окрестности заданной точки. Это соответствует методу Интегрирование.

Поскольку даже простой расчёт может требовать значительного времени, может оказаться полезным знать как его скорость зависит от выставленных параметров. Время расчёта для метода Интегрирование зависит только от радиуса интегрирования. Время расчёта для метода Монте-Карло, зависит в основном только от параметра Качество (также есть некоторая зависимость от локальной топографии поверхности).

4.7 Артефакты линий сканирования

Этот раздел описывает функции для выделения и исправления различных артефактов в данных СЗМ, связанных с получением данных линия за линией. Методы выравнивания и коррекции линий сканирования нередко требуют значительного изменения данных, которого следует по возможности избегать. К сожалению, дефекты линий сканирования встречаются очень широко, и, опять же, очень часто, их исправление может быть единственным способом работать с данными дальше. Тем не менее, данные методы должны использоваться с осторожностью.

Также рекомендуется ознакомиться с разделом Редактирование и исправление данных, который посвящен более общим методам исправления локальных дефектов.

Выравнивание строк

Профили, взятые вдоль оси быстрого сканирования (обычно ось x), могут быть взаимно сдвинуты на некоторое значение или иметь несколько иной уклон. Основные функции коррекции линий исправляют это несоответствие. Основная функция коррекции линий Обработка данных → Исправить данные → Выровнять строки работает с этим типом несоответствий используя несколько разных алгоритмов коррекции:

Срединное Основные методы коррекции основаны на расчёте некоторой высоты, представляющей данную линию скана, и её вычитании, тем самым перемещая линии на одинаковую высоту. Здесь в качестве такой высоты используется срединное значение линии скана.

Мода высоты Этот метод отличается от Срединного только используемым значением: модой распределения высоты. Разумеется, мода всего лишь оценивается поскольку доступен только конечный набор высот.

Полиномиальное Метод Полиномиальное аппроксимирует строку полиномом заданной степени и вычитает его значения из данных строки. Для нулевой степени полинома из каждой строки вычитается среднее значение, для степени 1 вычитается наклон, для степени 2 дуга окружности, и т.д.

Срединное разностей В отличие от методов сдвига характерной высоты каждой строки, Срединное разности сдвигает линии таким образом, что срединное значение разницы (между соседними по вертикали точками) становилось равным нулю. Следовательно, она лучше сохраняет крупные детали, в то же время она более чувствительна к сильно испорченным строкам.

Соответствие Этот алгоритм в некоторой степени можно считать экспериментальным, однако иногда он может пригодиться. Он минимизирует определённую функцию разности линий, которая придаёт больший вес плоским областям и меньший областям с большими наклонами.

Наклон с выравниванием граней Этот метод был создан вдохновляясь модулем Выравнивания граней, он наклоняет отдельные линии сканирования таким образом, чтобы сделать самые часто встречающиеся векторы нормали вертикальными. Это убирает только наклон; смещения линий по высоте сохраняются. В одномерном случае это несколько менее эффективный подход по сравнению с изображениями. Однако, этот метод может исправлять наклон в некоторых сложных случаях, когда другие методы вообще не работают.

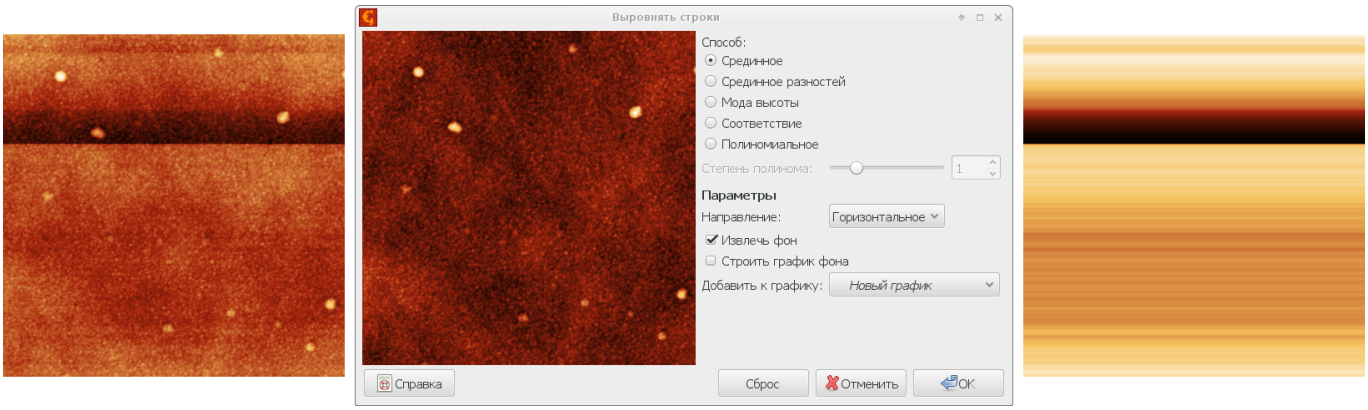
Усечённое среднее Усечённое среднее лежит между обычным средним значением и срединным, в зависимости от того, насколько большая часть наибольших и наименьших значений будет отброшена. Для нулевого усечения (0) этот метод будет эквивалентен вычитанию среднего значения или Полиномиальному со степенью 0, для максимально возможного усечения (0.5) он эквивалентен Срединному.

Усечённое среднее разностей Этот метод похожим образом предлагает непрерывный переход между Срединным разности и вычетом среднего значения. Он делает нулевыми усечённые средние разности высот (между соседними по вертикали пикселями). Для максимально возможного усечения (0.5) он эквивалентен Срединному разности. Поскольку средняя разность эквивалентна разнице средних значений (в отличие от срединных), для отсутствия усечения (0) он в свою очередь будет эквивалентен Полиномиальному со степенью 0.

Также, как и для двумерного полиномиального выравнивания, фон, т.е. значения, которые вычитаются из каждой строки, можно извлечь в другое изображение. Или построить в виде графика поскольку значения будут одинаковыми для всей строки.

Функция коррекции линий поддерживает использование маски, что позволяет исключить из рассмотрения крупные объекты на изображении, которые могут препятствовать корректной работе алгоритмов. Опции работы с масками будут представлены только если маска присутствует на данном изображении. Следует заметить, что инструмент Выровнять вдоль линии описанный ниже предоставляет другой способ выбрать фрагменты изображения, которые должны быть выровнены. Этот подход может быть более удобным в ряде случаев.

Подсказка Можно использовать Ctrl-F (Повторить последний) чтобы применить коррекцию с теми же настройками к нескольким изображениям не заходя в диалоговое окно.

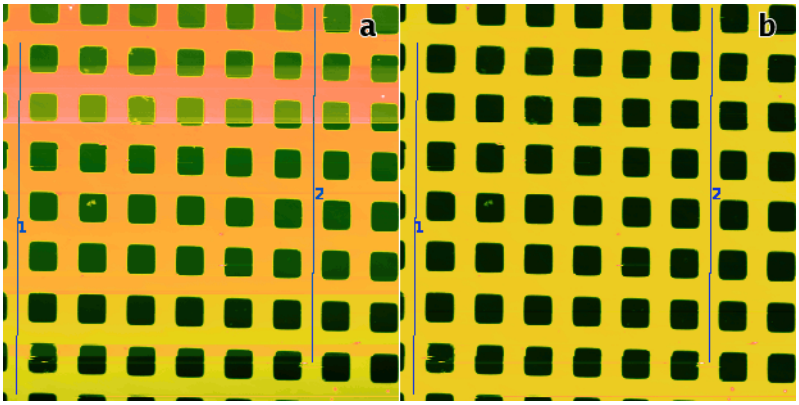


Пример коррекции линий: изображение с дефектами (слева), диалог выравнивания строк с предпросмотром коррекции по срединному (по центру), и извлекаемый фон строк (справа). Следует заметить, что масштабы шкалы псевдоцвета на этих изображениях будут различны.

Инструмент выравнивания вдоль линии

Инструмент Выровнять вдоль линии может использоваться для коррекции высот в выбранном подмножестве строк на сложных изображениях.

Вначале необходимо выбрать несколько прямых линий на данных. Пересечения этих линий со строками затем формируют набор точек в каждой строке, которые будут использованы для выравнивания. Строки сдвигаются вверх и вниз с целью минимизации разницы высоты точек в граничащих строках. Строки, которые не пересекаются ни одной линий не сдвигаются (относительно соседних строк).



Пример выравнивания вдоль линии: (a) исходные данные со ступенями, которые автоматические способы могут исправлять с ошибками, выбраны две подходящих выравнивающих линии; (b) результат применения выравнивания вдоль линии с шириной линии 5.

Линейная коррекция ступеней

Функция Линейная коррекция ступеней пытается работать со сдвигами, которые происходят посреди линии скана. Она пытается определить смещённые сегменты в строках и исправить высоту каждого подобного сегмента индивидуально вычетом среднего значения. Вследствие этого, она нередко может исправить данные с разрывом в середине строки.

Эту функцию следует считать несколько экспериментальным и точный алгоритм её работы может изменяться в дальнейшем. Следует заметить, что она по прежнему выравнивает все строки подобно методу Среднее в модуле Выровнять строки. См. функцию Блочная коррекция ступеней как метод, который пытается убрать прыжки высоты, сохраняя остальные параметры.

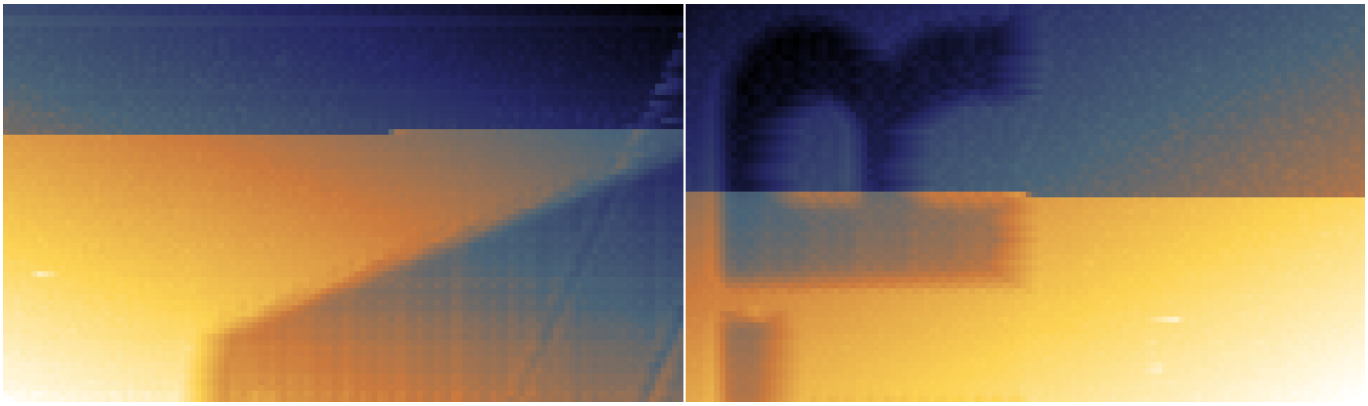
Блочная коррекция ступеней

Функция Блочная коррекция ступеней также пытается исправить прыжки высоты, которые могут происходить внутри линии сканирования. Она также пытается менять изображение как можно меньше, т.е. меньше,

чем Линейная коррекция ступеней, которая применяет несколько более агрессивный способ исправления (и, следовательно, в общем случае более успешно удаляет все точки прыжков, до тех пор, пока сопутствующее выпрямление линии сканирования не начинает мешать дальнейшей работе).

Блочная коррекция ступеней находит внезапные прыжки, рассчитывает их высоту и затем смещает высоту отдельных блоков внутри линии сканирования между прыжками. Отсюда возникает слово «блочная» в её названии. В областях, где нет таких прыжков, соотношения высоты между строками сканирования сохраняются как они были.

Поскольку смещаются целые блоки, важную роль играет направление сканирования, поскольку оно определяет какие пиксели формируют непрерывный блок. Оно должно быть выбрано в пункте настроек Направление сканирования. Направления указаны как при сканировании сверху вниз в медленной оси сканирования. При сканировании снизу вверх их значения инвертированы. Если функция испытывает затруднения в обнаружении очевидных скачков проверьте, что направление сканирования задано правильно.



Примеры артефактов в форме ступеней при сканировании сверху вниз в медленной оси. Слева: слева направо. Справа: справа налево.

Порог задаёт чувствительность, т.е., другими словами, насколько большие прыжки будут считаться нарушением непрерыности. Он задаётся как множитель среднего квадратичного всех различий между двумя соседними пикселями по вертикали. При выборе Помеченные разрывы на вкладке Показать можно посмотреть все места, где разница высоты превышает заданный порог. Опция Помеченные границы блоков возможно будет более полезной, поскольку она показывает где происходит нарушение непрерывности, и где будут гранизы между двух блоков. Общее количество обнаруженных скачков показывается под опцией Порог.

Хороший средний профиль

Выбирая среднюю или срединную строку всего изображения используя Инструмент статистики строк/столбцов можно получить чистые профили изображения, образованного повторяющимся сканированием одной и той же характерной части. Это иногда делается путём полного отключения медленной оси сканирования, и с включенной осью, но со значительно уменьшенным диапазоном сканирования вдоль медленной оси. Если на изображении присутствуют дефекты, их надо исключить с использованием маски. Если доступны и прямой, и обратный сканы, их сравнение позволяет определить какая часть профилей является хорошей и какая содержит дефекты.

Функция Хороший средний профиль упрощает этот подход в ряде типичных ситуаций:

- Если доступны только два изображения, выберите другое изображение в качестве Второе изображение. Набор пикселей с максимальным различием между изображения будет отброшен, что контролируется опцией Степень обрезки. Остальные используются чтобы рассчитать среднее значение в столбце, в результате получается очищенный средний профиль.
- Если доступно только одно изображение, сравнение изображений становится невозможным. Следовательно, простое усеченное среднее по столбцам используется вместо него. Степень обрезки снова контролирует количество отбрасываемых пикселей - в этом случае эта доля применяется к каждому столбцу изображения независимо.

В обоих режимах показывается либо график профиля, либо изображение с соответствующей маской исключаемых пикселей. Модуль также показывает вариацию, т.е. интеграл модуля производной. Большое значение

вариации соответствует более шумному или рваному профилю. Следовательно, меньшие значения обычно соответствуют более хорошим профилям.

Пометить инвертированные строки

Функция Пометить инвертированные строки находит линии изображения с перевёрнутыми вертикально особенностями и помечает их маской. Инверсия строк это пример артефакта, который случается, например, в магнитно-силовой микроскопии. Поскольку строка обычно перевёрнута сильно приблизительно, простая смена знака будет плохим вариантом исправления и обычно нужно использовать интерполяцию функцией Лапласа для исправления.

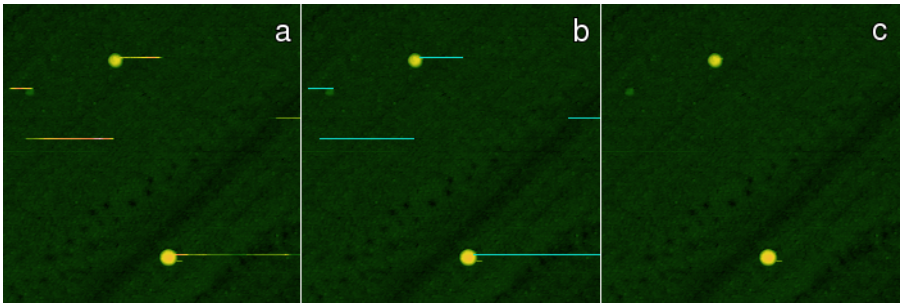
Пометить царапины

Обработка данных → Исправить данные → Пометить царапины

Подобным образом, модуль Пометить царапины может создавать маску точек, рассматриваемых как царапины. В отличие от модуляУдалить царапины, который напрямую интерполирует обнаруженные дефекты, этот модуль позволяет интерактивно задавать несколько параметров для тонкой настройки процесса выделения царапин:

- Максимальная ширина – только те царапины, толщина которых равна или меньше заданного значения (в пикселях), будут помечены.
- Минимальная длина – только царапины, которые равны или длиннее заданной величины (в пикселях) будут помечены.
- Жёсткий порог – минимальная разница значений относительно соседних верхней и нижней линии, которая будет считаться дефектом. Единицы считаются относительно среднеквадратичного отклонения изображения.
- Мягкий порог – значения, отличающиеся не меньше, чем на заданную величину не образуют дефектов сами, но присоединяются к дефектам полученным по жёсткому порогу если они граничат с ними.
- Положительные, Отрицательные, Оба – типы дефектов, которые будут удалены. Положительные означают дефекты с выпадающими значениями выше нормальных (пики), отрицательные – дефекты с выпадающими значениями ниже нормальных (дыры).

После нажатия на кнопку Ok новая маска царапин будет наложена на изображение. Другие модули и инструменты могут затем применяться для редактирования этих данных.



Пример выделения и удаления царапин: (a) исходные данные с дефектами, (b) данные с помеченными дефектами, (c) исправленные данные.

Удалить царапины

Обработка данных → Исправить данные → Удалить царапины

Царапины (полосы, штрихи) – части изображения, повреждённые очень распространённой ошибкой сканирования: локальным сбоем петли обратной связи. Линейные дефекты обычно параллельны оси быстрого сканирования изображения. Эта функция автоматически находит и удаляет эти царапины. используя соседние линии чтобы «заполнить» пустоты. Метод запускается с настройками, установленными при последнем использовании функции «пометить царапины».

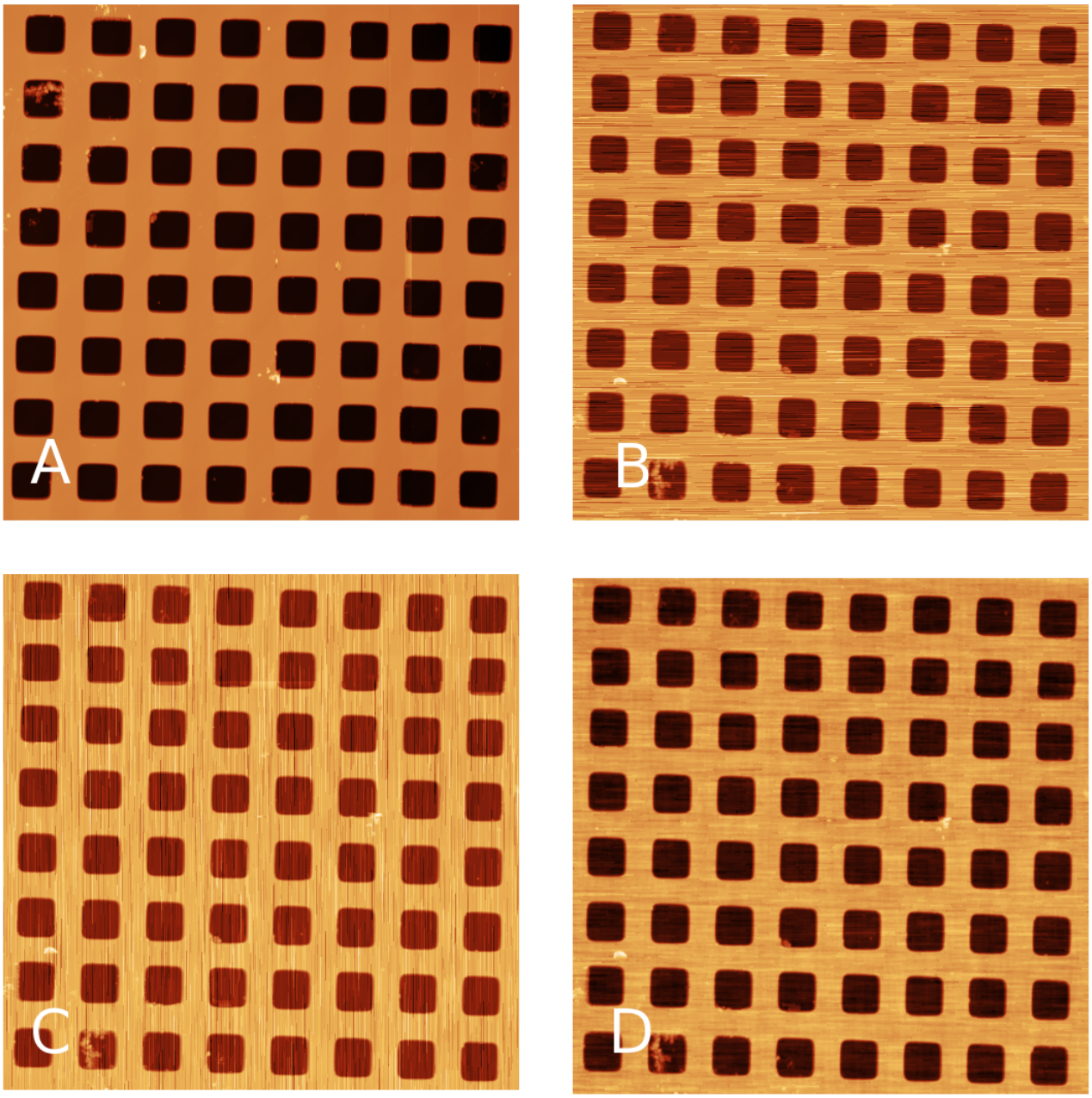
Удаление шума XY

Обработка данных → Множественные данные → Удалить шум XY

Функция убирает шум на изображении на основе двух измерений одной и той же области – одного при сканировании вдоль оси x и второго вдоль оси y (и повернутым таким образом, чтобы оказаться ориентированными таким же способом, как изображении при сканировании вдоль x). Она основана на работах E. Anguiano и M. Aguilar (см. [1]).

Удаление шума работает путём применения преобразования Фурье к обоим изображениям, комбинировании информации в пространстве частот, и затем использовании обратного преобразования Фурье для получения изображения, очищенного от шума. Оно полезно для удаления больших царапин и полос в направлении быстрой оси сканирования.

Изображения не используются симметрично в данной процедуре. Используя опцию Усреднить направления удаления шума можно применить опцию в обоих направлениях и усреднить результаты.



Модель процедуры удаления шума XY: A) исходные данные, B) модель измерения по оси x, C) модель измерения по оси Y, D) изображение без шума.

Источники

[1] E. Anguiano and M. Aguilar: A cross-measurement procedure (CMP) for near noise-free imaging in scanning microscopes. Ultramicroscopy, 76 (1999) 47 doi:10.1016/S0304-3991(98)00074-6

4.8 Локальные дефекты

Несколько модулей, которые позволяют прямо или косвенно редактировать данные СЗМ. Хотя большая часть модулей обработки данных меняет их тем или иным образом, в этом разделе описаны те модули и инструменты, которые специально предназначены для коррекции локальных дефектов изображения. Они удаляют «плохие» данные из изображения и заменяют их с использованием одноги из методов интерполяции.

Методы для работы с дефектами, связанными со сканированием описаны также в разделе Линейные артефакты сканирования.

Инструмент удаления пятен

«Инструмент удаления пятен» может использоваться для удаления малых участков изображения, которые можно считать ошибкой сканирования, пылинкой или ещё чем-то, что не должно присутствовать в данных. Следует заметить, что подобные действия могут кардинально поменять статистические параметры поверхности, следовательно, убедитесь, что вы не удаляете вещи, которые присутствуют на реальной поверхности.

В процессе использования этого инструмента можно выбрать пятно, чтобы увеличить его окружение в окне инструмента. Затем, в этом окне, выберите прямоугольник или эллипс (в зависимости от выбранной Формы) вокруг области, которую вы хотите убрать. Можно выбрать один из нескольких методов интерполяции для создания данных на месте бывшего «пятна»:

- Выравнивание гиперболами использует информацию с границ выбранной области для интерполяции информации внутри области.
- Решение уравнения Лапласа решает уравнение Лапласа для расчёта данных внутри области; граница используется как виртуальный источник.
- Псевдо-лапласов является более быстрой аппроксимацией настоящего решения уравнения Лапласа. Для небольших областей всегда можно использовать настоящее решение.
- Фрактальная коррекция использует полное изображение для определения фрактальной размерности. После этого создаются случайные неравномерные данные с той же фрактальной размерностью и помещаются в выбранную область.
- Фрактально-лапласова смесь является взвешенным средним между фрактальной интерполяцией и решением уравнения Лапласа. Внутренняя часть задаётся фрактальной интерполяцией, но вблизи границ области подмешивается интерполяция уравнением Лапласа чтобы получить более гладкое продолжение внешней текстуры.
- Обнулить просто заполняет область нулями.

Нажатие на кнопку Применить выполнит выбранный алгоритм.

Замечание Удаление пятен работает только для областей размером 80 × 80 точек или меньше. Для удаления больших областей, создайте маску используя инструмент Редактор масок, затем можно использовать Обработка данных → Исправить данные → Интерполировать данные под маской.

Инструмент удаления зёрен

Простой инструмент удаления зёрен удаляет выбранные вручную связные части маски или интерполирует данные под ними, или совершает оба этих действия. Часть маски, которую нужно удалить, выбирается щелчком по ней левой кнопки мыши.

Доступные способы интерполяции являются подмножеством таковых, предлагаемых в инструменте удаления пятен, в частности обнуление, решение уравнения Лапласа, фрактальная интерполяция и их смешанный вариант.

Интерполировать данные под маской

Обработка данных → Исправить данные → Интерполировать данные под маской

Эта функция заменяет данные под маской на решение уравнения Лапласа. Значения данных на границе области под маской задают граничные условия. Решение вычисляется итерационным методом и чтобы он сошелся может потребоваться какое-то время.

Обнулить данные под маской

Обработка данных → Исправить данные → Обнулить данные под маской

Эта функция просто заполняет данные под маской нулями, что иногда меньше отвлекает чем результат интерполяции.

Фрактальная коррекция

Обработка данных → Исправить данные → Фрактальная коррекция

Модуль фрактальной коррекции, подобно модулю Интерполировать данные под маской, заменяет данные под маской. Однако, он использует другой алгоритм для получения новых данных: сперва рассчитывается фрактальная размерность полного изображения и затем области под маской заменяются случайной шероховатой поверхностью, имеющей ту же фрактальную размерность. Среднеквадратичное значение неровностей высоты (шероховатость) не меняется при использовании этого модуля.

Замечание Расчёт может занять некоторое время, поэтому запаситесь терпением.

Внимание Применение этого модуля для данных, которые не обладают фрактальными свойствами может вызывать сильно нереалистичные результаты и строго не рекомендуется.

Маска выпадающего

Обработка данных → Исправить данные → Маска выпадающего

Этот модуль создаёт маску областей данных, которые не соответствуют критерию 3σ. Все данные выше и ниже доверительного интервала помечаются маской и могут впоследствии редактироваться или обрабатываться другими модулями, например, интерполяции данных под маской. Этот метод выделения выпадающих областей полезен для глобальных выпадающих областей, со значениями, сильно отличающимися от остальных данных.

Маска несвязного

Обработка данных → Исправить данные → Маска несвязанного

Местные выпадающие это значения, которые выделяются из окружения. Функция Пометить несвязанные выделяет данные, которые кажутся не попадающими в типичное распределение значений в их локальном окружении.

Тип выделяемых выпадающих значений может быть выбран из Положительного, Отрицательного или Обоих для значений, соответственно, больше окружения, меньше и обоих типов одновременно. Следует заметить, что выбор варианта Оба может выделять области, отличающиеся от варианта, когда отдельно были выбраны положительные и отрицательные выпадающие и их маски затем были скомбинированы.

Выделение продолжается дальше вычитанием локального фона из изображения и затем выделением глобальных выпадающих в получаемом уплощенном изображении. Более точно, локальный фон получается с помощью фильтра размыкания (минимум), замыкания (максимум) или медианного фильтра заданного радиуса. Радиус фильтра управляется настройкой радиус дефекта. Она определяет максимальный размер дефекта, который может быть обнаружен и выделен. Однако, обычно полезнее использовать больший радиус, чем действительный максимальный размер дефекта.

Чувствительность выделения дефектов регулируется опцией Порог. Меньшие значения соответствуют более умеренному выделению, т.е. меньше значений будет помечено как выпадающие. Большее значение означает больше значений, помеченных как выпадающие.

4.9 Общие искажения

Этот раздел описывает расширенные функции по коррекции (или созданию) общих погрешностей, таких как модуляция данных низкой частотой или дрейф медленной оси сканирования. Большинство описанных ниже функций имеют дело с искажениями только в плоскости xy– например, Компенсация дрейфа или Выпрямить путь. Некоторые модифицируют распределение данных (Вынудить) или производят сложные операции, затрагивающие как координаты, так и значения в точках.

Компенсировать дрейф

Обработка данных → Искажение → Компенсировать дрейф

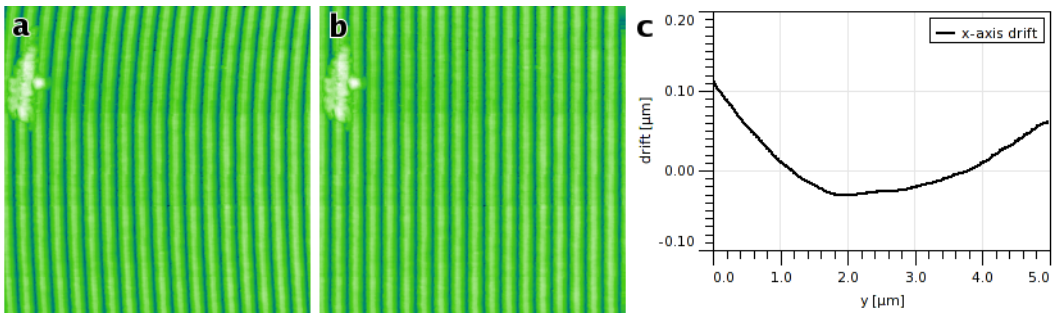
Функция «компенсировать дрейф» рассчитывает и/или корректирует дрейф в быстрой оси сканирования (горизонтальной). Этот неблагоприятный эффект может быть вызван тепловым воздействием или недостаточной механической жесткостью устройства измерения.

График дрейфа, который является одним из возможных получаемых результатов, представляет горизонтальный сдвиг отдельных строк по отношению к строке-эталону (которая может быть, в принципе, выбрана произвольно, на практике выбирают нулевой сдвиг чтобы минимизировать количество данных, которые теряются за краем изображения после компенсации), с координатой y строки в качестве абсциссы.

Сдвиг определяется в два этапа:

1. Взаимное горизонтальное смещение оценивается для каждого набора строк расположенных не дальше Диапазон поиска друг от друга. Оно оценивается как значение сдвига, дающего максимальную взаимную корреляцию двух строк. Следовательно, в результате получается множество локальных оценок смещения строки (вместе с максимальным весом корреляции, который даёт оценку их взаимной похожести).
2. Глобальные сдвиги рассчитываются из локальных. В настоящее время используется очень простой метод поскольку он хорошо работает в большинстве случаев: локальные производные сдвига аппроксимируются для каждой строки в оценку локального сдвига и общий сдвиг затем получается путём интегрирования (т.е. сложения локальных дрейфов).

Опция Исключить линейный уклон вычитает линейный член из рассчитанного дрейфа. это может быть полезно, когда изображение является анизотропным и его выраженные детали считаются ориентированными непараллельно сторонам изображения.



Пример коррекции дрейфа: (a) исходные данные с сильным дрейфом в оси быстрого сканирования, (b) исправленные данные, (c) рассчитанный график дрейфа.

Аффинное искажение

Обработка данных → Искажение → Аффинное

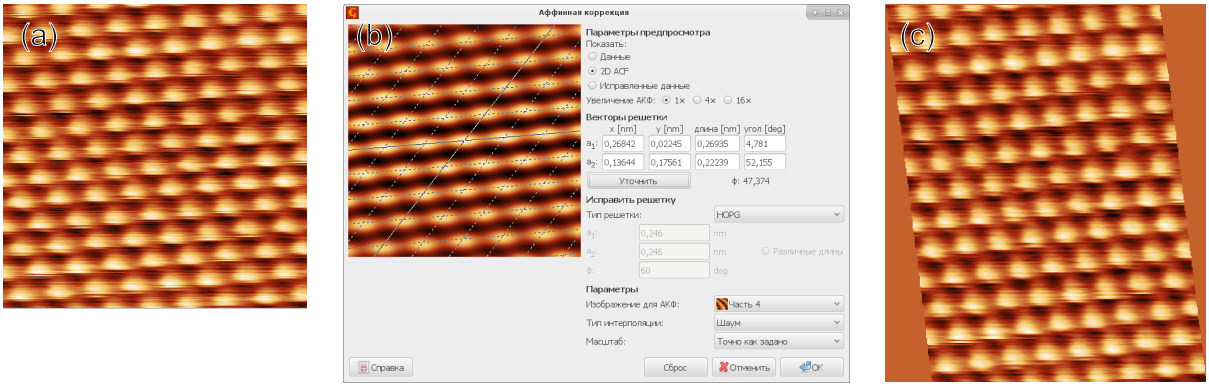
Аффинное искажение в горизонтальной плоскости вызванное термическим дрейфом является обычным явлением, например, в СТМ. Если изображение содержит регулярную структуру, например, атомную решетку с известными параметрами, искажение может быть легко исправлено с использованием этой функции.

Коррекция аффинных искажений требует прежде всего выбрать искаженную решетку на изображении. Это делается перемещением сетки на изображении предпросмотра с помощью мыши пока она не станет соответствовать периодическим особенностям изображения. Для изображений периодических структур обычно проще выбирать решетку на графике двумерной функции автокорреляции (2D ACF). Также обычно для этого нужно найти вручную достаточно грубое соответствие. Кнопка уточнить поможет рассчитать точные значения выбранных векторов решетки для ближайших максимумов в функции автокорреляции с субпиксельной точностью.

Если линии сканирования содержат много высокочастотного шума, горизонтальная автокорреляционная функция (средняя строка на изображении АКФ) также может оказаться достаточно шумной. В этом случае лучше интерполировать её по окружающим строкам используя опцию Интерполировать горизонтальную АКФ.

Правильные длины векторов решетки a_1 и a_2 и угла φ между ними, введённые в диалоговом окне, определяют производимое аффинное преобразование. Некоторые распространённые типы решеток (такие, как поверхность

высокоориентированного пирографита HOPG) уже есть в предустановках, но можно вводить произвольные длины и угол.



Пример аффинной коррекции: (a) оригинальное изображение, демонстрирующее аффинные искажения, (b) диалог коррекции, демонстрирующий выбранную решетку на двумерной функции автокорреляции, (c) исправленное изображение.

Следует отметить, что описанный выше метод коррекции вызывает полную потерю латеральных размеров изображения поскольку новый латеральный размер будет определяться исключительно правильными векторами решетки. Это обычно является лучшим вариантом для изображений СТМ известных атомных решеток, однако, в общем случае коррекций наклона и аффинных искажений он может оказаться непрактичным. Следовательно, диалоговое окно предлагает три различных варианта масштабирования:

Точно как задано Вектора решетки в исправленном изображении будут иметь заданную длину и угол между ними. Информация о масштабе исходного изображения полностью игнорируется.

Сохранять площадь Вектора решетки в исправленном изображении будут иметь заданное соотношение длин и угол между ними. Однако, общий масштаб будет скорректирован таким образом, чтобы аффинное преобразование пространства сохраняло площади областей.

Сохранять масштаб X Вектора решетки в исправленном изображении будут иметь заданное соотношение длин и угол между ними. Однако, общий масштаб будет вычисляться таким образом, чтобы аффинное преобразование сохраняло оригинальный масштаб оси x. Этот режим в чём-то похож на работу с масштабами в модуле компенсации дрейфа.

Данная функция также может исправить одно изображение, используя автокорреляционную функцию, рассчитанную из другого (подразумевается другой канал данных в одном измерении) или применить коррекцию ко всем изображениям в файле. Первое можно сделать выбрав другое изображение в качестве Изображения для АКФ в опциях. Аффинное преобразование всех изображений в файле включается опцией Применить ко всем совместимым изображениям. Обе опции требуют чтобы изображения были совместимы с текущим, т.е. имели одинаковое физическое разрешение и разрешение в пикселях.

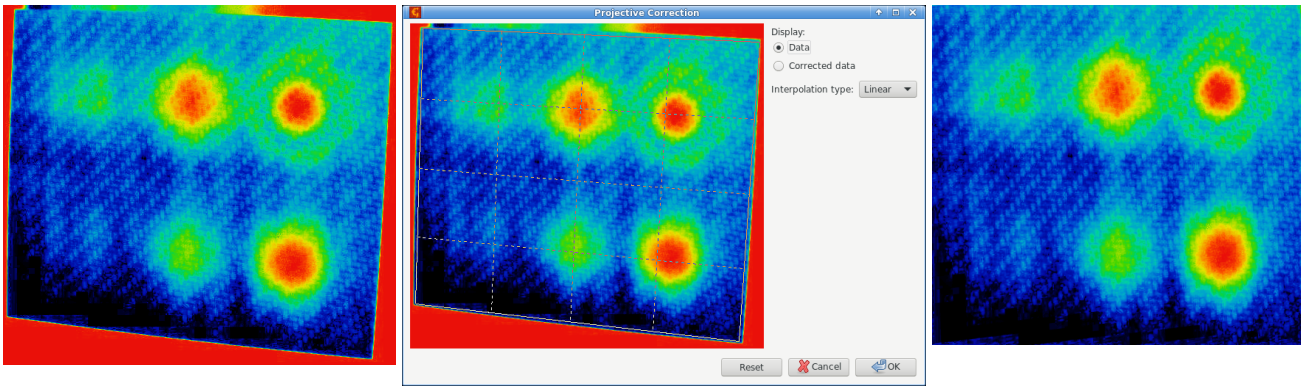
Искажение перспективы

Обработка данных → Искажение → Перспективы

Искажение перспективы обычно не встречается в сканирующей зондовой микроскопии, но относительно часто происходит в других видах получения изображений. Модуль коррекции перспективных искажений может исправлять этот дефект в то случае, если изображение содержит какие-то формы, про которые точно известно что они прямоугольные.

Чтобы применить коррекцию, прямоугольник, задающий перспективу, выбирается на изображении перемещением его четырёх углов. Выбранная область после этого преобразуется и результат коррекции извлекается в новое изображение. Изображение предпросмотра можно переключать между исходными и исправленными данными.

Модуль задаёт физические размеры и размеры в пикселях результирующего изображения в разумные по его оценке значения, которые рассчитываются в предположении, что искажение невелико. Размеры при этом более-менее соответствуют выбранному прямоугольнику с искажением на исходном изображении. Однако, это всего лишь оценка. Если размеры получаемого прямоугольника можно определить более точно, например, используя метки на изображении, их лучше задать используя инструмент Размеры и единицы измерения.



Пример коррекции искажения перспективы. Слева оригинальное изображение, демонстрирующее искажение перспективы, по центру диалог коррекции, демонстрирующий выбранный прямоугольник на изображении, справа исправленное изображение.

Опция Создать новое изображение управляет тем, будет ли изображения заменяться исправленным или создаваться новое изображение. Функция также может применить коррекцию ко всем совместимым изображениям в файле.

Полиномиальное искривление

Обработка данных → Искажение → Полиномиальное

Общее искривление в горизонтальной плоскости может быть компенсировано или, наоборот, внесено с помощью полиномиального искривления. Оно делает преобразования, которые могут быть выражены как

$$x_{\text{old}} = P_x(x_{\text{new}}, y_{\text{new}}),$$
$$y_{\text{old}} = P_y(x_{\text{new}}, y_{\text{new}}),$$

где P_x и P_y – полиномы степени до третьей с заданными пользователем коэффициентами. Следует отметить направление преобразования координат – обратное направление не будет гарантировать однозначного отображения.

Полиномиальные коэффициенты вводятся как безмасштабные, т.е. как если диапазоны координат были всегда [0, 1]. Если включено Обновлять сразу, нажатие Enter в поле ввода коэффициента (или просто перемещение фокуса клавиатуры в другое место) обновляет предпросмотр.

Выпрямить путь

Обработка данных → Искажение → Выпрямить путь

Извлечение данных вдоль дугообразных особых областей, искривлённых границ ступеней и других гладких путей произвольной формы могут оказаться удобным вариантом предобработки для дальнейшего анализа. Функция Выпрямить путь создаёт новое изображение путём «выпрямления» исходного вдоль пути, заданного сплайном, проходящим через набор точек, выбранных на изображении.

Точки, задающие путь, могут быть выбраны на изображении предпросмотра. Любую контрольную точку можно двигать мышью. Клик на пустое место добавляет новую точку, привязанную к ближайшему концу пути. Отдельные точки можно удалить если выбрать их в списке точек в правой части диалогового окна и нажать Delete.

Форма извлекаемой области управляется следующими параметрами:

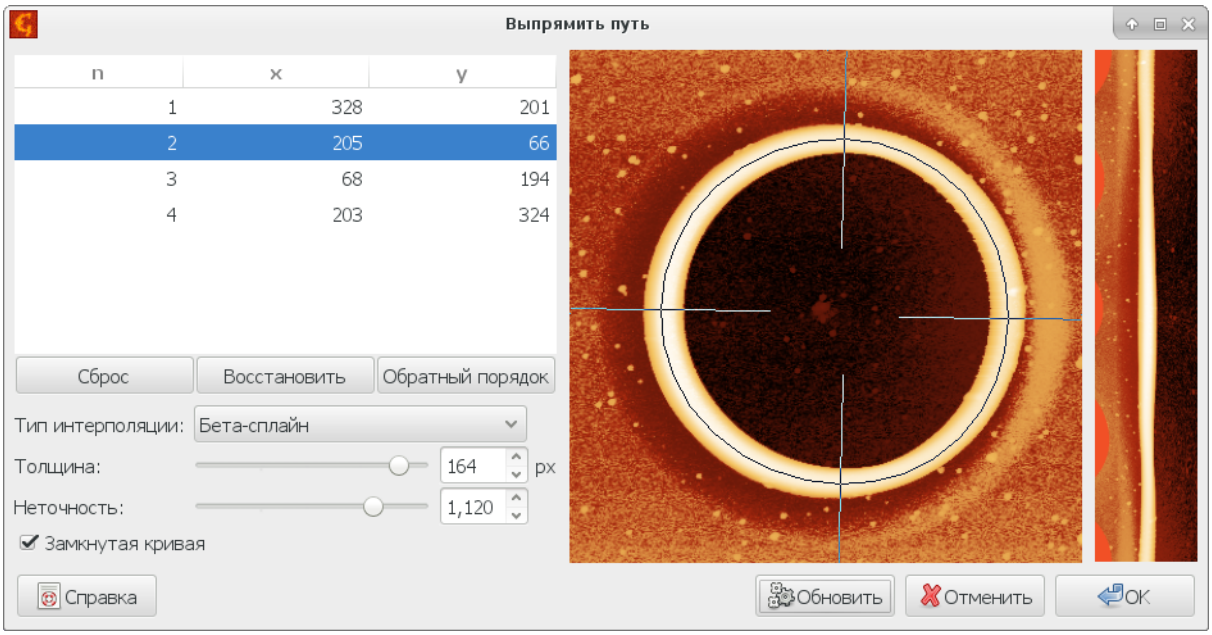
Толщина Ширина извлекаемого изображения, обозначаемая перпендикулярными отметками на линии пути. Здесь это полная ширина, т.е. расстояние до каждого края извлекаемого изображения будет половиной заданной толщины.

Неточность Параметр, влияющий на форму пути между контрольными точками. Он может быть показан как слабина упругой пружины, соединяющей контрольные точки. Для нулевой слабины пружина будет туго натянута и путь будет формироваться прямыми сегментами. Увеличение слабины уменьшает натяжение в пружине вплоть до единичной, при которой пружина полностью свободна. Значения больше единицы означают, что длина пружины слишком велика и она будет сжиматься.

Замкнутая кривая Если включена эта опция, путь будет замкнут, что позволяет извлекать кольцевые области (как пример). В противном случае у пути будет два свободных конца.

Нажатие кнопки Обновить рассчитывает изображение предпросмотра для извлекаемого изображения и показывает его справа от входного изображения. Изображение предпросмотра показывается вертикально, верхняя грань соответствует началу пути и нижняя его концу. Извлекаемое изображение может быть ориентировано либо подобным образом, либо горизонтально (слева направо) в зависимости от выбора опции Направление вывода.

Для определённых комбинаций формы и толщины пути результирующее изображение может содержать области, которые лежат вне исходного изображения. Эти области будут помечены маской на выводимом изображении и заполнены нейтральными значениями.



Пример применения функции Выпрямить путь, показывающий извлечение данных вдоль замкнутого кругового пути. Левая часть диалогового окна содержит координаты точек, задающих путь и опций данной функции, средняя часть показывает выбранный круговой путь (с перпендикулярными маркерами, показывающими толщину), правая часть показывает изображение предпросмотра для извлекаемых данных.

Извлечь выбранный путь

Обработка данных → Искажение → Извлечь выбранный путь

Функция Выпрямить путь сохраняет выбранный путь вместе с данными, так что её можно вызвать заново позднее. Если вам нужны координаты и/или направления, соответствующие выпрямленному изображению, для дальнейшей обработки, то можно использовать опцию Извлечь выбранный путь.

Эта функция строит действительные координаты или касательные к пути, т.е. направляющие синусы и косинусы в виде графиков. Координаты выбраны как положение X и положение Y ; направления как касательная по X и касательная по Y. Количество точек в каждой кривой графика будет таким же, как число строк в выпрямленном изображении, созданном функцией Выпрямить путь, а строки изображения будут соответствовать одна к одной точкам кривой графика.

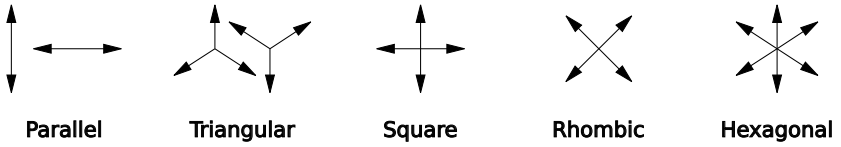
Исправить разворот

Обработка данных → Исправить данные → Исправить разворот

Исправить разворот может автоматически сделать главные оси изображения параллельными горизонтальным или вертикальным сторонам изображения. Чтобы это работало, у данных должны быть эти главные оси, следовательно, этот метод наиболее полезен при сканировании искусственных и, возможно, кристаллических структур.

Поворот, необходимый для выравнивания изображения – показанный как Поправка – рассчитывается из пиков на угловом распределении наклонов предполагая преобладающий тип структуры или симметрию. Симметрия также может быть оценена автоматически, но можно выбрать какой-то тип симметрии вручную и оставить модулю расчёт только соответствующего корректирующего поворота. Следует заметить, что если вы выбрали тип структуры, не соответствующий реальности, то рассчитанный поворот редко когда будет иметь смысл.

Рекомендуется перед расчётом выровнять данные (или выровнять грани) поскольку общий наклон может исказить рассчитанный поворот.



Ориентация главных осей в соответствии с типами симметрии, доступных при коррекции поворота.

Предполагаемый тип структуры может быть задан с помощью меню выбора Предполагаемая. Доступен выбор из следующих вариантов:

Найденная Автоматически определённый тип симметрии, показанный выше как обнаруженный.

Параллельная Параллельные линии, одно преимущественное направление.

Треугольная Треугольная симметрия, три преимущественных направления (однонаправленных) под углами 120 градусов.

Квадрат Прямоугольная симметрия, два преимущественных направления приблизительно вдоль сторон изображения.

Ромбическая Ромбическая симметрия, два преимущественных направления приблизительно вдоль диагоналей. Единственным отличием от прямоугольной симметрии является предпочтение диагональной ориентации (в противоположность параллельной сторонам изображения).

Гексагональная Гексагональная симметрия, три преимущественных направления (двунаправленных) под углами 120 градусов.

Поле смещения

Поле смещения это общий метод искажения изображения в плоскости xy. Каждой точке результирующего изображения присваивается вектор. Этот вектор определяет в каком направлении двигаться из этой точки. Значение, найденное по заданному смещению в исходном изображении становится значением пикселя в выходном изображении:

$$z(x,y) = z_{\text{source}}\big(x + v_x(x,y), y + v_y(x,y)\big)$$

где $\mathbf{v}$ - вектор смещения.

Поле смещения может быть создано или получено несколькими способами:

Гауссово (линии скана) Вектора содержат только компоненту x. Смещение будет одномерным, вдоль линий сканирования (строк изображения). Это случайное гауссово изображение, подобное гауссовым изображениям генерируемым с помощью Спектрального синтеза.

Гауссово (двумерное) Вектора содержат обе компоненты x и y, следовательно смещение будет двумерным. В этом случае это снова случайное гауссово изображение.

Разрывать линии скана Вектора содержат только компоненту x. Смещение будет одномерным, вдоль линий сканирования (строк изображения). Оно генерируется чтобы разорвать сегменты соседних строк смещением одной из них влево и другой вправо. В оставшейся части изображения смещение гладкое (и близкое к нулю), таким образом, непрерывность сохраняется вне разрыва.

Изображение (линии скана) Вектора содержат только компоненту x. Смещение будет одномерным, вдоль линий сканирования (строк изображения), и задаётся другим изображением (выбранным в качестве Смещения по X). Значения изображения используются напрямую в качестве векторов смещения и должны иметь ту же размерность, что и пространственные координаты деформируемого изображения.

Изображение (двумерное) Вектора содержат обе компоненты x и y, следовательно смещение будет двумерным. Они задаются другими изображениями (выбранными в качестве Смещения по X и Смещения по Y). Значения изображений используются напрямую в качестве векторов смещения и должны иметь ту же размерность, что и пространственные координаты деформируемого изображения.

Задать статистику

Обработка данных → Искажение → Задать статистику

Этот модуль преобразует значения в поле данных таким образом, чтобы установить некоторые заданные статистические свойства. Распределение значений может быть преобразовано в гауссово, с сохранением среднего значения и среднеквадратичной шероховатости, или равномерное, с сохранением минимального и максимального значения. Также можно установить такое же распределение, как у другого поля данных, выбранного в качестве шаблона.

Преобразование сохраняет порядок значений, т.е. если некоторая точка была выше другой до преобразования, она также будет выше после него. Опция обработка данных управляет тем, будет ли преобразование применяться к изображению целиком (Всё изображение) или к каждой строке отдельно, с одинаковым распределением (По строкам (одинаково)). Следует отметить, что если в последнем случае выбран шаблон для распределения, то каждая строка преобразованного изображения будет иметь (примерно) такое же распределение значений как шаблон.

В дополнение можно проводить другой тип преобразования, дискретизацию значений на заданное количество уровней. Эта операция выбирается с помощью опции Дискретные уровни. Доступны два различных типа дискретизации, либо уровни высоты равноудалены от минимального и максимального значения (Равномерное), либо они рассчитываются таким образом, чтобы после преобразования каждый уровень состоял из примерно одинакового количества пикселей (Одинаковая площадь).

Радиальное сглаживание

Обработка данных → Искажение → Радиальное сглаживание

Радиальное сглаживание обрабатывает изображение гауссовым сглаживающим фильтром, но в полярных координатах. Эта функция полезна для изображений которые должны быть относительно гладкими и демонстрировать радиальную симметрию.

Изображение может сглаживаться либо вдоль радиальных профилей - с шириной гауссова фильтра управляемой опцией Радиус - или в угловом направлении воль дуги постоянного радиуса вокруг центра - с шириной, управляемой параметром Угол. Преобразование изображения в полярные координаты и назад не идеально сохраняет его. При этом могут появляться небольшие (и иногда не столь небольшие) артефакты, в частности около центра, даже если сглаживание при этом не использовалось.

4.10 Статистический анализ

При анализе случайно шероховатых поверхностей нередко требуется статистический подход для определения набора описывающих эту поверхность величин. В Gwyddion реализовано несколько различных подходов как это можно сделать. В этом разделе мы опишем различные статистические инструменты и модули, представленные в Gwyddion, а также представим основные формулы, которые использовались для разработки лежащих в их основе алгоритмов.

Данные сканирующей зондовой микроскопии обычно представляются как двумерное поле данных размера $N \times M$ где N и M – число строк и столбцов поля данных, соответственно. Настоящая площадь этого поля обозначается как $L_x \times L_y$, где L_x и L_y – размеры вдоль соответствующих осей. Интервал дискретизации (расстояние между двумя соседними точками в скане) обозначается Δ. Мы предполагаем, что интервал дискретизации одинаков как в x, так и в y-направлении и что высота поверхности в заданной точке (x,y) может быть описана случайной функцией $\xi(x,y)$ с заданными статистическими свойствами.

Следует заметить, что данные АСМ обычно собираются как линейные сканы вдоль оси x, которые объединяются вместе, чтобы сформировать двумерное изображение. Следовательно, скорость сканирования в направлении x значительно больше, чем скорость сканирования вдоль оси y. В результате, статистические свойства данных АСМ обычно собираются вдоль профилей, параллельных оси x, поскольку на них меньше влияет низкочастотный шум и температурный дрейф образца.

Инструмент статистические величины

Статистические величины включают в себя основные свойства распределения значений высоты, включая его дисперсию, коэффициент асимметрии и эксцесс. Величины, доступные в меню инструмента Статистические величины программы Gwyddion, разделены на несколько групп.

Основанные на моментах

Основанные на моментах величины выражаются через интегралы функции распределения высот с некоторыми степенями высоты. Они включают в себя привычные величины:

- Среднее значение.
- Среднеквадратичное значение или СКВ неровностей высоты S_q: это значение вычисляется из второго центрального момента значений данных.
- Значение среднеквадратичного отклонения зерён которое будет отличаться от обычного среднеквадратичного только при использовании маски. Среднее значение при этом определяется отдельно для каждого зерна (непрерывной части маски или инвертированной маски, в зависимости от типа маскирования) и дисперсия затем вычисляется относительно этих средних для зёрен значений.
- Средняя шероховатость или S_a нерегулярностей высоты.
- Коэффициент асимметрии распределения высот рассчитывается из третьего центрального момента значений данных.
- Эксцесс распределения высот рассчитывается из четвёртого центрального момента значений данных.

Точнее, среднеквадратичное отклонение (σ), коэффициент асимметрии (γ_1), и эксцесс (γ_2) вычисляются из центральных моментов i-того порядка μ_i

$$\mu_i = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(z_n - \bar{z})^i$$

где $\bar{z}$ обозначает среднее значение. Они выражаются следующими формулами:

$$\sigma = \mu_2^{1/2}\,, \quad \gamma_1 = \frac{\mu_3}{\mu_2^{3/2}}\,, \quad \gamma_2 = \frac{\mu_4}{\mu_2^2} - 3$$

Следует отметить, что Gwyddion рассчитывает избыточный эксцесс, который будет равен нулю для гауссова распределения. Добавьте 3 если вам нужен параметр текстуры области Sku.

Средняя шероховатость S_a похожа на значение среднеквадратичного отклонения, отличие состоит в том, что она рассчитывается как сумма модулей разности между значением данных и средним, вместо квадратов разности.

Порядковые

Порядковые величины представляют собой значения, соответствующие определённому положению если все значения будут упорядочены. Они включают в себя:

- Минимум, максимум, срединное значение.
- Максимальная высота пика S_p, которая отличается от максимума тем, что рассчитывается относительно средней высоты.
- Максимальная глубина впадины S_v, которая отличается от минимума тем, что рассчитывается относительно средней высоты.
- Максимальная высота S_z, полный диапазон значений. Это общая разность между минимумом и максимумом или, что то же самое, между S_v и S_p.

Гибридные

Гибридные величины комбинируют высоты и пространственные отношения в плоскости поверхности и включают в себя:

- Площадь проекции и площадь поверхности: подсчитывается простой триангуляцией.
- Объём, рассчитанный как интеграл высоты поверхности по области, покрытой маской.
- Средний уклон граней в области: вычисляется усреднением нормализованных векторов направления граней.
- Вариация, которая рассчитывается как интеграл модуля локального градиента.
- Наклон поверхности, определяется как среднеквадратичный локальный градиент. Другими словами, сначала вычисляется среднеквадратичное значение локального градиента. Наклон затем получается как корень из этого числа.

Площадь поверхности оценивается следующим методом. Пусть z_i для $i = 1, 2, 3, 4$ обозначает значения в четырёх соседних точках (центрах пикселей), а h_x и h_y - размеры пикселей вдоль соответствующих осей. Если дополнительная точка помещается в центр прямоугольника который соответствует общему углу четырёх пикселей (используя среднее значение четырёх пикселей), образуются четыре треугольника и площадь поверхности может

быть приближенно оценена суммированием их площадей. Это приводит к следующим формулам для площади одного треугольника (верхняя) и площади поверхности для одного пикселя (нижняя):

$$A_{12} = \frac{h_x h_y}{4}\sqrt{1 + \left(\frac{z_1 - z_2}{h_x}\right)^2 + \left(\frac{z_1 + z_2 - 2\bar{z}}{h_y}\right)^2}$$

$$A = A_{12} + A_{23} + A_{34} + A_{41}$$

Теперь этот метод хорошо определён для внутренних точек области. Каждое значение участвует в восьми треугольниках, по два с каждым из четырёх соседних значений. Половина из этих треугольников лежит внутри одного пикселя, другая половина в другом пикселе. Подсчётом площади, лежащей внутри каждого пикселя, общая площадь определяется также для зерён и областей под маской. Осталось определить её для граничных пикселей всего поля данных. Мы это делаем виртуально расширяя поле данных копией граничного ряда пикселей с каждой стороны для расчёта площади поверхности, таким образом делая все интересующие нас пиксели внутренними.

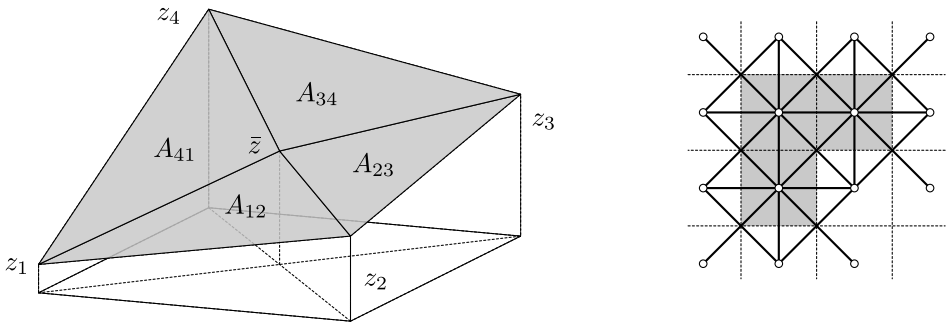


Схема триангуляции при рассчёте площади поверхности (слева). Применение схемы триангуляции (справа) к области под маской из трёх пикселей, т.е. зерну. Малые круги обозначают вершины в центрах пикселей z_i, тонкие пунктирные линии обозначают границы пикселей, толстыми линиями показано разбиение на треугольники. Оценка площади поверхности равна области под маской (серой) на этой схеме.

Прочие

Дополнительно инструмент рассчитывает некоторые значения, которые трудно отнести к какой-то из предыдущих категорий:

- Нессответствие линий скана, характеризующая различия между линиями скана. Оно может быть показано следующим образом: если каждая линия изображения будет заменена средним двух соседних линий, новое изображение будет немного отличаться от оригинального. Взяв среднеквадратичную разницу и поделив на среднеквадратичное значение изображения, мы получаем показываемое значение несоответствия.

Подсказка По умолчанию инструмент «Статистические величины» показывает значения для всего изображения. Если вам нужно исследовать определённую область внутри изображения, просто щёлкните мышью и обведите её прямоугольником. Окно инструмента обновится с новыми значениями основанными на новой области. Если вы снова хотите просмотреть статистику для всего изображения, щёлкните один раз на окне данных и инструмент сбросится в исходное состояние.

Инструмент статистические функции

Одномерные статистические функции доступны при использовании инструмента Статистические функции. В окне инструмента можно выбрать, какую функцию нужно рассчитать, используя выпадающий список слева, озаглавленный Тип вывода. Предпросмотр графика будет обновляться автоматически. Можно выбрать направление, в котором будут рассчитываться функции (горизонтальное или вертикальное), но, как уже говорилось выше, мы рекомендуем использовать направление быстрой оси сканирования. Также можно выбрать, какой из методов интерполяции использовать. После того, как выбор закончен, можно нажать кнопку Применить чтобы закрыть окно инструмента и вывести новое окно графика, которое содержит статистические данные.

Подсказка Подобно инструменту Статистические величины, этот инструмент оценивает по умолчанию всё изображение, но при желании можно выбрать область, на которой будет проводиться анализ.

Функции распределения высоты и углов

Простейшими статистическими функциями являются функции распределения высот и наклонов. Они могут быть рассчитаны как неинтегральные (т.е. плотности) и как интегральные. Эти функции рассчитываются как нормированные гистограммы значений высоты или наклона (полученного как производные в выбранном направлении – горизонтальном или вертикальном). Другими словами, величина по абсциссе в «распределении углов» – тангенс угла, а не сам угол.

Нормировка плотностей $\rho(p)$ (где p – соответствующая величина, высота или наклон) такова, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(p)\,\mathrm{d}p = 1$$

Очевидно, что масштаб значений при этом не зависит от числа точек данных и числа выборок в гистограмме. Интегральные распределения – интегралы плотностей и они принимают значения из интервала $[0,1]$.

Величины первого порядка против величин второго порядка

Величины распределений высот и углов относятся к статистическим величинам первого порядка, описывающих только статистические свойства отдельных точек. Однако, для полного описания свойств поверхности необходимо изучать функции более высоких порядков. Обычно применяются статистические величины второго порядка, описывающие взаимные соотношения пар точек на поверхности. К этим функциям относятся функция автокорреляции, функция корреляции высота-высота и функция спектральной плотности мощности. Далее следует описание каждой из них:

Функция автокорреляции

Функция автокорреляции задаётся как

$$\begin{aligned} G(\tau_x,\tau_y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} z_1 z_2 w(z_1,z_2,\tau_x,\tau_y)\,\mathrm{d}z_1\,\mathrm{d}z_2 \\ &= \lim_{S\to\infty}\frac{1}{S}\iint_S \xi(x_1,y_1)\,\xi(x_1+\tau_x,y_1+\tau_y)\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}y_1 \end{aligned}$$

где z_1 и z_2 – значения высоты в точках (x_1,y_1), (x_2,y_2); при этом $\tau_x = x_1 - x_2$ и $\tau_y = y_1 - y_2$. Функция $w(z_1,z_2,\tau_x,\tau_y)$ обозначает двумерную плотность вероятности случайной функции $\xi(x,y)$, соответствующей точкам (x_1,y_1), (x_2,y_2) и расстоянию между этими точками τ.

Из дискретных данных АСМ можно извлечь эту функцию в виде

$$G(m,n) = \frac{1}{(N-n)(M-m)}\sum_{l=1}^{N-n}\sum_{k=1}^{M-m} z_{k+m,l+n} z_{k,l}$$

где $m = \tau_x/\Delta x$, $n = \tau_y/\Delta y$. Следовательно, эта функция может быть рассчитана для дискретного набора значений τ_x и τ_y, разделённых интервалами дискретизации Δx и Δy, соответственно.

Для измерений АСМ мы обычно рассчитываем одномерную функцию автокорреляции основанную на профилях вдоль оси быстрого сканирования. Следовательно, она может рассчитываться из дискретных данных АСМ как

$$G_x(m) = G(m,0) = \frac{1}{N(M-m)}\sum_{l=1}^{N}\sum_{k=1}^{M-m} z_{k+m,l} z_{k,l}$$

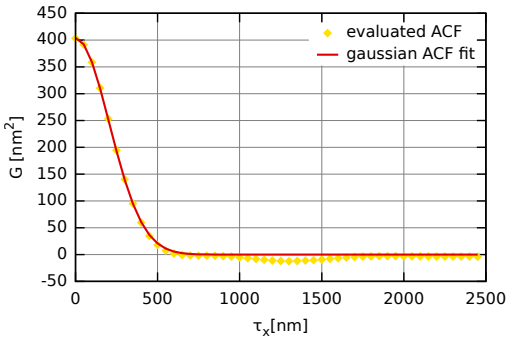
Одномерная функция автокорреляции нередко считается имеющей форму гауссовой, т.е. заданной следующим соотношением:

$$G_x(\tau_x) = \sigma^2 \exp(-\tau_x^2/T^2)$$

где σ обозначает среднеквадратичное отклонение высот и T обозначает длину автокорреляции.

Для экспоненциальной функции автокорреляции у нас получается следующее соотношение

$$G_x(\tau_x) = \sigma^2 \exp(-\tau_x/T)$$



Функция автокорреляции, полученная для модели гауссовой случайной шероховатой поверхности (т.е. с гауссовой функцией автокорреляции) с $\sigma \approx 20\,\mathrm{nm}$ и $T \approx 300\,\mathrm{nm}$.

Мы можем также ввести радиально усреднённую функцию автокорреляции $G_\mathrm{r}(\tau)$, т.е. усреднённую вдоль заданного углом направления двумерную функцию автокорреляции, которая, естественно, содержит ту же самую информацию, что и одномерная функция автокорреляции для изотропных поверхностей:

$$G_\mathrm{r}(\tau) = \int_0^{2\pi} W(\tau\cos\varphi, \tau\sin\varphi)\,\mathrm{d}\varphi$$

Замечание Для оптических измерений (т.е. спектроскопической рефлектометрии, эллипсометрии) гауссова функция автокорреляции обычно ожидается достаточно хорошо совпадающей со свойствами поверхности. Однако, некоторые статьи, связанные с ростом поверхности и окислением, обычно предполагают, что экспоненциальная форма ближе к реальности.

Функция распределения границы

Функция распределения границы (ФРГ) это вторая производная от АКФ

$$I(\tau) = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} G(\tau)$$

Положения и знаки её экстремумов связаны со значениями вроде размера зёрен и межзёренных расстояний.

Функция корреляции высота-высота

Различие между функцией корреляции высота-высота и функцией автокорреляции очень мало. Как и в случае с функцией автокорреляции, мы суммируем произведение двух различных значений. Для функции автокорреляции эти значения представляют различные расстояния между точками. Для функции корреляции высота-высота мы вместо этого используем степень разности между точками.

Для измерений АСМ мы обычно рассчитываем одномерную функцию корреляции высота-высота, основанную только на профилях вдоль быстрой оси сканирования. Следовательно, она может быть рассчитана из дискретных значений данных АСМ как

$$H_x(\tau_x) = \frac{1}{N(M-m)} \sum_{l=1}^{N} \sum_{n=1}^{M-m} (z_{n+m,l} - z_{n,l})^2$$

где $m = \tau_x/\Delta x$. Таким образом, функция может быть рассчитана на дискретном наборе значений τ_x разделённом интервалом дискретизации Δx.

Одномерная функция корреляции высота-высота нередко считается имеющей форму гауссовой, т.е. заданной следующим соотношением:

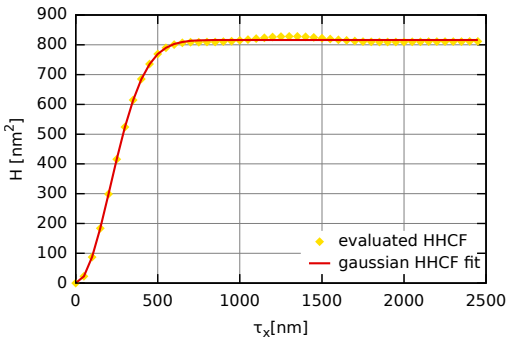
$$H_x(\tau_x) = 2\sigma^2 \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_x^2}{T^2}\right)\right]$$

где σ обозначает среднеквадратичное отклонение высот и T обозначает длину автокорреляции.

Для экспоненциальной функции корреляции высота-высота у нас получается следующее соотношение

$$H_x(\tau_x) = 2\sigma^2 \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_x}{T}\right)\right]$$

На следующем рисунке функция корреляции высота-высота построена для модели гауссовой поверхности. Она аппроксимирована формулой, приведённой выше. Результирующие значения σ и T полученные аппроксимацией функцией корреляции высота-высота практически те же, что и для функции автокорреляции.



Функция корреляции высота-высота полученная для модели гауссовой случайно шероховатой поверхности с $\sigma \approx 20\,\mathrm{nm}$ и $T \approx 300\,\mathrm{nm}$.

Функция спектральной плотности мощности

Двумерная функция спектральной плотности мощности может быть записана в терминах преобразования Фурье от функции автокорреляции

$$W(K_x, K_y) = \frac{1}{4\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} G(\tau_x, \tau_y)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(K_x\tau_x + K_y\tau_y)}\, \mathrm{d}\tau_x\, \mathrm{d}\tau_y$$

Подобно функции автокорреляции, мы также обычно рассчитываем одномерную функцию спектральной плотности мощности, которая задана уравнением

$$W_1(K_x) = \int_{-\infty}^{\infty} W(K_x, K_y)\, \mathrm{d}K_y$$

Эта функция может быть расчитана с помощью быстрого преобразования Фурье следующим образом:

$$W_1(K_x) = \frac{2\pi}{NMh} \sum_{j=0}^{M-1} |\hat{P}_j(K_x)|^2$$

где $P_j(K_x)$ – коэффициент Фурье для j-той строки, т.е.

$$\hat{P}_j(K_x) = \frac{h}{2\pi} \sum_{n=0}^{N-1} z_{nj} \exp(-\mathrm{i}K_x nh)$$

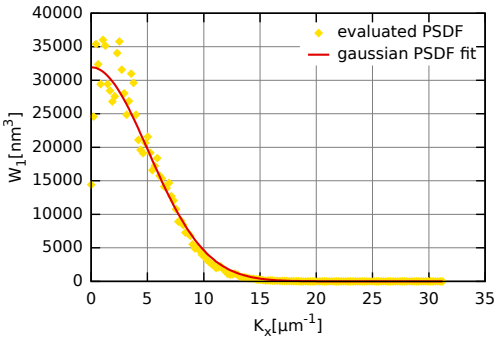
Если мы выберем гауссову функцию автокорреляции, соответствующее гауссово соотношение для функции спектральной плотности мощности будет следующим:

$$W_1(K_x) = \frac{\sigma^2 T}{2\sqrt{\pi}} \exp(-K_x^2 T^2/4)$$

Для поверхности с экспоненциальной функцией автокорреляции мы имеем

$$W_1(K_x) = \frac{\sigma^2 T}{\pi} \frac{1}{1 + K_x^2 T^2}$$

На следующем рисунке построены результирующая функция спектральной плотности мощности и её аппроксимация для той же самой поверхности, что использовалась для функции автокорреляции и функции корреляции высота-высота. Можно видеть, что функция может быть снова аппроксимирована гауссовой функцией спектральной плотности мощности. Результирующие значения σ и T практически те же самые, что и для аппроксимации функции автокорреляции и функции корреляции высота-высота.



Функция спектральной плотности мощности полученная для данных, смоделированных с гауссовой функцией автокорреляции.

Мы можем также ввести радиальную функцию спектральной плотности мощности $W_\mathrm{r}(K)$, т.е. интегрированную вдоль заданного углом направления двумерную функцию спектральной плотности мощности, которая, естественно, содержит ту же самую информацию, что и одномерная функция спектральной плотности мощности для изотропных шероховатых поверхностей:

$$W_\mathrm{r}(K) = \int_0^{2\pi} W(K\cos\varphi, K\sin\varphi)\,K\,\mathrm{d}\varphi$$

Для поверхности с гауссовой функцией автокорреляции эта функция может быть выражена как

$$W_\mathrm{r}(K) = \frac{\sigma^2 T}{2} KT \exp(-K^2T^2/4)$$

для поверхностей с экспоненциальной как

$$W_\mathrm{r}(K) = \sigma^2 T \frac{KT}{(1+K^2T^2)^{3/2}}$$

Подсказка В Gwyddion можно аппроксимировать все представленные здесь статистические функции их гауссовыми и экспоненциальными формами. Чтобы это сделать, сначала нажмите Применить в окне инструмента Статистические функции. При этом будет создано новое окно графика. При выбранном этом окне, нажмите на График → Аппроксимировать график.

Спектральная плотность также может интегрироваться в радиальном направлении, давая угловой спектр. Его пики могут быть использованы для определения основных направлений в текстуре изображения.

Функционалы Минковского

Функционалы Минковского используются для описания глобальных геометрических характеристик структур. Двумерный дискретный вариант объема V, поверхности S и связности (характеристики Эйлера – Пуанкаре) χ рассчитываются в соответствии со следующими формулами:

$$V = \frac{N_\mathrm{white}}{N}\,, \quad S = \frac{N_\mathrm{bound}}{N}\,, \quad \chi = \frac{C_\mathrm{white} - C_\mathrm{black}}{N}$$

Здесь N обозначает общее число пикселей, N_white обозначает число «белых» пикселей, пикселей выше порога. Пиксели, которые ниже порога, называются «чёрными». Символ N_bound обозначает число границ между чёрными и белыми пикселями. И, наконец, C_white и C_black обозначают число непрерывных наборов белых и чёрных пикселей, соответственно.

Для изображений с непрерывным набором значений функционалы параметризованы по значению порога высоты ϑ, который отделяет белые пиксели от чёрных, т.е. они могут рассматриваться как функции этого параметра. И эти функции $V(\vartheta)$, $S(\vartheta)$ и $\chi(\vartheta)$ строятся.

Распределение диапазонов

Распределение диапазонов это график роста диапазона значений от пространственного расстояния. Это всегда неубывающая функция.

Для каждого пикселя изображения и каждого расстояния по горизонтали можно рассчитать минимальное и максимальное из значений, которые лежат не далее заданного расстояния от выбранного пикселя. Локальный диапазон это разность между максимумом и минимумом (и в двумерном случае может быть показано используя функцию презентации Ранга). Усреднение локальных диапазонов для всех пикселей изображения даёт кривую распределения диапазонов

График функции относительной площади

График функции относительной площади показывает отношение площади развитой поверхности и площади проекции за вычетом единицы как функцию от масштаба, на котором рассчитывается площадь поверхности. Из за вычета единицы, которой равно отношение для полностью плоской поверхности, величина называется «избыточной» площадью.

Подобно функциям корреляции, избыточная площадь может быть определена как направленная величина. Однако, функция, показанная в иструменте, предполагает изотропную поверхность, горизонтальное или вертикальное направление, которые можно выбрать, задают только основное направление, используемое в расчёте.

Статистические функции под маской

Большая часть статистических функций поддерживает использование масок. Другими словами, они могут быть рассчитаны для областей изображения произвольной формы. Для некоторых из них, таких как распределение высот или углов, не требуется дополнительных пояснений: в расчёте используются только пиксели изображения под (или не под) маской. Однако, смысл функции менее ясен для функций корреляции и спектральных плотностей.

Мы покажем его для автокорреляционной функции (простейший случай). Полное описание можно найти в литературе [1]. Формула для дискретной автокорреляционной функции может быть переписана как

$$G_x(m) = G(m,0) = \frac{1}{|\Omega_m|} \sum_{(k,l)\in\Omega_m} z_{k+m,l} z_{k,l}$$

где Ω_m это набор пикселей изображения внутри области для которой пиксель m столбцов правее также лежит внутри области. если мы рассчитываем функцию автокорреляции для прямоугольной области, например для всего изображения, ничего не меняется. Однако, данная формула достоверно задаёт функцию для областей любой формы. Осталось только понять, как можно эффективно проводить такой расчёт.

Для этого мы определяем $c_{k,l}$ как маску нужных пикселей, которая равна 1 для пикселей, которые мы хотим включить и 0 для пикселей, которые мы исключаем из расчёта. Из этого следует что

$$|\Omega_m| = \sum_{l=1}^{N} \sum_{k=1}^{M-m} c_{k+m,l} c_{k,l}$$

Далее, если данные изображения перед расчётом умножить на $c_{k,l}$ то сумму автокорреляционной функции для неправильной области можно заменить на обычную сумму автокорреляционной функции по всему изображению. И то, и другое можно эффективно рассчитывать с помощью быстрого преобразования Фурье.

Важно отметить, что количество информации, доступной в данных об автокорреляционной функции для заданной m зависит от Ω_m. В отличие от прямоугольных изображений, она не должна монотонно убывать с увеличением m и может меняться произвольным образом. Там могут быть даже вырезы, т.е. горизонтальные интервалы m для которых область не содержит пар пикселей с нужным расстоянием между ними. Если это происходит, то Gwyddion заменяет отсутствующие значения используя линейную интерполяцию.

Функция корреляции высота-высота рассчитывается подобным образом, только суммы должны быть разбиты на части, которые затем рассчитываютсяя с использованием БПФ. Для ФСПМ это невозможно поскольку каждый коэффициент в разложении Фурье зависит от каждого значения данных. Таким образом, вместо этого, рассчитывается циклическая автокорреляционная функция таким же образом, как АКФ, а ФСПМ получается как результат её преобразования Фурье.

Инструмент статистики строк/столбцов

Инструмент Статистики по строкам/столбцам рассчитывает численные характеристики каждой строки или столбца и строит их как функции его/её положения. Это делает его в некоторой степени дополнительным к инструменту Статистические функции. Доступные величины включают в себя:

- Среднее значение, минимум, максимум, срединное значение.
- Среднеквадратичное значение неровностей высоты: это значение вычисляется из дисперсии данных R_q..
- Коэффициент асимметрии и эксцесс распределения высот.
- Длина линии поверхности. Эта величина оценивается как общая длина прямых сегментов, соединяющих значения данных в строке (столбце).
- Общий уклон, т.е. тангенс средней линии, аппроксимирующей строку (столбец).
- Тангенс β_0. Это характеристика крутизны локальных уклонов, близко связанная с поведением функций автокорреляции и корреляции высота-высота в нуле. Для дискретных значений она вычисляется следующим образом:

$$\tan^2 \beta_0 = \frac{1}{(N-1)h^2} \sum_{i=1}^{N-1} (z_i - z_{i-1})^2$$

- Стандартные параметры шероховатости Ra, Rz, Rt.

В дополнение к графику, показывающему значения для индивидуальных строк/столбцов, среднее значение и среднеквадратичное отклонение выбранной величины рассчитывается из набора отдельных значений для строк/столбцов. Следует подчеркнуть, что стандартное отклонение выбранной величины представляет собой разброс значений для отдельных строк/столбцов и не может рассматриваться как ошибка аналогичной двумерной величины.

Инструмент длины корреляции

Инструмент длина корреляции можно использовать для быстрой оценки длины автокорреляции изображения T на основе линий скана. Длина автокорреляции оценивается с использованием нескольких распространенных методов. Показываются результаты сразу всех методов, что позволяет выбрать наиболее подходящий (и сразу сравнить насколько расчёты по разным методам отличаются).

Наивное затухание АКФ до 1/e Горизонтальное расстояние, на котором дискретная одномерная АКФ затухает до $1/e$ от своего максимального значения (которое она достигает в нуле). Это общепринятое определение, соответствующее также выражениям для гауссовой и экспоненциальной АКФ.

Экстраполированное затухание АКФ до 1/e Наивная оценка будет смещена. Простой и более-менее свободный от предположений метод коррекции это экстраполяция на бесконечно длинную линию сканирования зная известные асимптотические зависимости от длины линии сканирования [2,3]. Это результат подобной экстраполяции.

Затухание АКФ до нуля Горизонтальное расстояние, на котором дискретная одномерная АКФ затухает до нуля. Не часто встречающаяся, но иногда полезная характеристика затухания АКФ.

Аппроксимация ФСПМ гауссианой Длина автокорреляции полученная аппроксимацией оценка одномерной ФСПМ используя модель гауссовой автокорреляции. Оценка будет иметь смысл только если АКФ шероховатости действительно близка к гауссовой.

Аппроксимация ФСПМ экспонентой Длина автокорреляции полученная аппроксимацией оценки одномерной ФСПМ используя модель экспоненциальной автокорреляции. Оценка будет иметь смысл только если АКФ шероховатости действительно близка к экспоненциальной.

Инструмент также показывает отношение между длиной автокорреляции T и размером изображения L (или точнее длиной линии сканирования).

Отношение $\alpha = T/L$ Это отношение используется для оценки отклонения параметров шероховатости вследствие конечной области измерения [2,3]. Длина автокорреляции берётся из экстраполяции затухания.

Размер изображения в единицах T Величина, обратная α измеряет сколько длин автокорреляции помещается в одну линию сканирования. Она несёт ту же информацию, но воспринимается проще.

Грубая оценка отклонения может быть получена следующим образом. Она в основном полезна чтобы оценить является ли размер скана достаточным или насколько результат может иметь отклонение - попытки использовать её для коррекции легко могут сделать всё ещё хуже.

1. Оценить α – например, с помощью данного инструмента.
2. Умножаем его на степень полинома, использованную при выравнивании линий сканирования плюс один. Это означает 1 для вычета среднего значения, 2 для коррекции наклона, 3 для коррекции кривизны и т.д.
3. Результат оценивает относительное отклонение измеренной шероховатости. Отклонение всегда отрицательно, поэтому нужно добавить минус, если это имеет значение.

Похожая процедура может использоваться при вычете двумерного фона. Однако, почти всегда применяется один из способов выравнивания строк - как минимум неявное вычитание среднего значения. И это тогда будет основным источником отклонения.

Инструмент может проводить коррекцию линий сканирования в процессе оценки. Это управляется опцией Выравнивание линий сканирования. По умолчанию вычитается смещение, что обычно является хорошим выбором. Можно переключиться в режим отсутствия выравнивания, если нужно использовать линии скана в точности как есть. Иногда может оказаться полезно сделать быструю коррекцию наклона. Если нужны более сложные исправления или вычет более высокого порядка полинома, нужно применить их явно с помощью инструмента Выровнять строки.

Двумерная функция автокорреляции.

Обработка данных → Статистика → Двумерная автокорреляция

Полная двумерная автокорреляционная функция введённая выше иногда используется для оценки анизотропии шероховатых поверхностей. Модуль двумерной АКФ рассчитывает функцию и может строить её сечения для выбранных направлений или рассчитывать некоторые параметры шероховатости, основанные на двумерной АКФ.

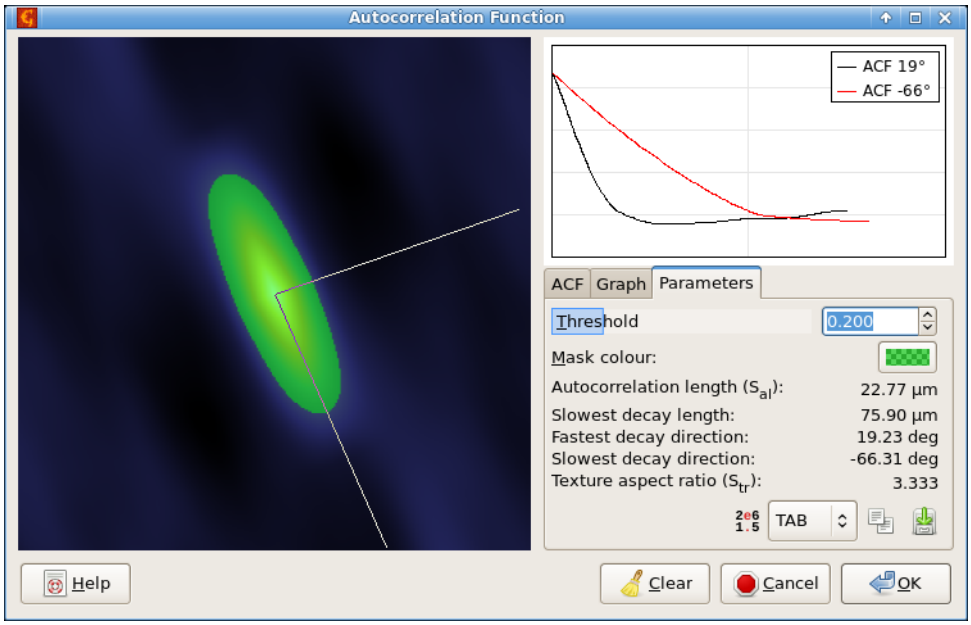
Опции на вкладке АКФ управляют тем, как функция рассчитывается и показывается. В большинстве случаев перед расчётом необходимо вычесть среднее значение (как это делает обнулить среднее значение). Это выбирается с помощью пункта Вычитание среднего значения в выравнивании данных. Однако, Выравнивание плоскости также может быть полезным. Если уровень нуля уже настроен правильно, то можно выбрать Нет для того, чтобы посчитать АКФ для неизменённых данных. Если на изображение наложена маска, диалоговое окно предлагает стандартные настройки для маски. Общее описание расчёта АКФ в случае использования маски приведено в описании статистических функций для изображений с маской.

Вкладка График содержит настройки для извлекаемых сечений АКФ. Они будут теми же, что и для обычного извлечения профилей.

Наконец, вкладка Параметры показывает различные численные параметры, полученные из двумерной АКФ. Они определяются из затухания АКФ в различных направлениях и зависят от значения Порога, ниже которого точки данных считаются в основном не коррелирующими. Область значений выше выбранного порога помечается маской на изображении АКФ.

Порог задаётся как доля по отношению к максимуму (находящемуся в начале кооординат). В теоретических моделях длина автокорреляции соответствует затуханию АКФ до $1/e$. Это также будет значением по умолчанию. Однако, в стандартах, описывающих шероховатость, он обычно выбирается равным 0,2. Для того, чтобы результаты можно было сравнивать, убедитесь, что вы используете везде одно и то же значение порога.

Длина автокорреляции S_{al} это кратчайшее расстояние на котором АКФ спадает до значений ниже порога. Соответствующее направление также показывается, также как и направление и расстояние наиболее медленного убывания. Отношение между наибольшими и наименьшими расстояниями это текстурный коэффициент поверхности S_{tr}.



Диалоговое окно двумерной функции автокорреляции показывающее таблицу с рассчитанными параметрами шероховатости.

Двумерная спектральная плотность.

Обработка данных → Статистика → 2D PSDF

Полная двумерная функция спектральной плотности используется для оценки характеристических пространственных частот поверхностей. Модуль двумерной ФСПМ рассчитывает функцию и может строить её сечения для выбранных направлений.

Опции на вкладке ПСПМ управляют тем, как функция рассчитывается и показывается. Опция Оконной функции выбирает тип окна. Если на изображение наложена маска, диалоговое окно предлагает стандартные настройки для маски. Общее описание расчёта ФСПМ в случае использования маски приведено в описании статистических функций для изображений с маской.

Вкладка График содержит настройки для извлекаемых сечений АКФ. Они будут теми же, что и для обычного извлечения профилей.

Наконец, вкладка Параметры демонстрирует некоторый набор численных параметров, полученных на основе двумерной ФСПМ. Два из них рассчитываются используя угловой спектр: направление текстуры S_{td} и индекс направления текстуры S_{tdi}. S_{td} задаётся направлением, в котором интеграл радиальной ФСПМ будет наибольшим и определяет основное направление текстуры. S_{tdi} измеряет насколько данное направление доминирует над остальными сравнивая среднее значение по всем направлениям с основным направлением. Следует заметить, что меньшее значение S_{tdi} соответствует большему весу основного направления (не меньшему).

Статистики двумерных наклонов

Несколько функций в меню Обработка данных → Статистика оперируют статистикой двухмерных наклонов (производных).

Распределение наклонов рассчитывает простое двухмерное распределение производных, то есть горизонтальные и вертикальные координаты результирующего поля данных это, соответственно, горизонтальные и вертикальные производные. Наклоны могут быть посчитаны как центральные производные (односторонние на границах изображения) или, если включена опция Использовать аппроксимацию локальной плоскостью, аппроксимацией локальной плоскостью окрестности каждой точки и использованием её градиента.

Распределение наклонов также может строить суммарные графики, представляющие одномерные распределения величин, относящихся к локальным уклонам и углам наклона граней задаваемым следующими уравнениями:

$$\mathbf{v} = \left(\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x}, \frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}y}\right), \quad v = |\mathbf{v}|, \quad \vartheta = \operatorname{atan} v, \quad \varphi = \operatorname{atan}_2(v_y, -v_x)$$

Доступны три различных графика:

- Наклон (ϑ), распределение угла наклона ϑ относительно горизонтальной плоскости. Естественно, что представление наклона в виде угла требует чтобы значения и пространственные координаты были одними физическими величинами.
- Наклон (градиент) напоминает график ϑ за исключением того, что строится распределение производной v вместо угла.
- Наклон (φ) показывает интеграл v^2 для каждого направления φ в горизонтальной плоскости. Это означает, что данная величина не просто распределение φ, поскольку области с большими уклонами вносят больший вклад, чем плоские области.

Функция Распределение углов - инструмент визуализации, который не рассчитывает распределение в строгом смысле. Для каждой производной v строится круг точек, удовлетворяющих уравнению

$$2\mathbf{r}\cdot\mathbf{v} = r^2$$

Число точек на круге задаётся параметром Число шагов.

Энтропия

Обработка данных → Статистика → Энтропия

Эта функция может оценивать дифференциальную энтропию распределений значений и уклонов, а также показывает визуализацию как она рассчитывается.

Дифференциальная энтропия Шеннона для функции плотности вероятности может быть выражена как

$$S = -\int_X p(x)\log p(x)\,\mathrm{d}x$$

где X — область определения переменной x. Например, для распределения высоты x представляет высоту поверхности и X будет всей действительной осью. Для распределения углов x это двухкомпонентный вектор, состоящий из производных по осям и X, соответственно, будет плоскостью.

Существует большое количество более или менее сложных методов оценки энтропии. Gwyddion использует относительно простой метод, основанный на гистограмме, в котором приведённая выше формула аппроксимируется с помощью

$$S \approx -\sum_{i=1}^{n} p_i \log\frac{p_i}{w_i}$$

где p_i и w_i — оценки плотности вероятности, т.е. нормализованное значение гистограммы и ширина i-той корзины гистограммы.

Естественно, оцениваемое значение энтропии зависит от выбора ширины корзины, за исключением равномерного распределения, где оценка от этого не зависит. Из этого следует, что для разумных распределений подходящей шириной корзины будет такая, при которой оценка энтропии не меняется при небольшом изменении ширины. Это и будет критерием выбора подходящей ширины корзины.

На практике это означает, что энтропия оценивается для большого диапазона вариантов ширины корзины (обычно много порядков величины), получая масштабную кривую, показываемую в виде графика в правой части диалогового окна. Энтропия после этого оценивается путём определения точки перегиба на кривой. Если такой точки нет, что может быть, например, если распределение очень близко к сумме δ-функций, в качестве энтропии будет выведено очень большое отрицательное значение.

Энтропии показываются без единиц измерения, поскольку они являются логарифмическими величинами. Для численного сравнения с другими расчётами, следует отметить, что в Gwyddion они всегда считаются из величин в основных единицах измерения СИ (т.е., например, в метрах при нанометровой шкале) и используются натуральные логарифмы. Следовательно, величины будут в естественных единицах информации (натах, nats)

Абсолютное значение энтропии зависит от абсолютной ширины распределения. Например, два гауссова распределения высот с различными значениями среднеквадратичного отклонения будут иметь различные значения энтропии. Это полезно, если мы хотим сравнивать абсолютную прямоту структур в распределении высот. С другой стороны, может оказаться полезным сравнить их способом, независимым от общего масштаба. Для этого мы можем использовать тот факт, что гауссово распределение будет иметь максимальную энтропию из всех распределений с одинаковым значением среднеквадратичного отклонения. Разница между максимальной и оцениваемой энтропией показывается как дефицит энтропии. По определению, она всегда положительна (кроме небольших отрицательных погрешностей, возникающих за счёт метода расчёта).

Ссылки

[1] D. Nečas and P. Klapetek: One-dimensional autocorrelation and power spectrum density functions of irregular regions. Ultramicroscopy 124 (2013) 13-19, doi:10.1016/j.ultramic.2012.08.002

[2] D. Nečas, P. Klapetek and M. Valtr: Estimation of roughness measurement bias originating from background subtraction. Measurement Science and Technology (2020) 094010, doi:10.1088/1361-6501/ab8993

[3] D. Nečas, M. Valtr and P. Klapetek: How levelling and scan line corrections ruin roughness measurement and how to prevent it. Scientific Reports 10 (2020) 15294, doi:10.1038/s41598-020-72171-8

4.11 Одномерные параметры шероховатости

Стандартизованные одномерные параметры шероховатости могут быть рассчитаны с помощью инструмента измерения шероховатости.

Одномерная текстура разбивается на волнистость (низкочастотные компоненты, определяющие общую форму) и шероховатость (высокочастотные компоненты) по частоте среза. Частота измеряется в долях от частоты Найквиста, то есть, значение 1.0 соответствует самой частоте Найквиста. Она также показывает как соответствующая ей длина волны в реальном пространстве.

В следующих формулах мы считаем среднее значение r_j равным нулю, т.е. оно содержит

$$r_j = z_j - \bar{z}$$

Параметры амплитуды шероховатости

Средняя шероховатость R_a Стандарты: ASME B46.1-1995, ASME B46.1-1985, ISO 4287-1997, ISO 4287/1-1997, ГОСТ 25142-82.

Среднее арифметическое отклонение профиля. Среднее отклонение всех точек профиля шероховатости от средней линии на длине оценки

$$R_\mathrm{a} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} |r_j|$$

Старым способом указания диапазона для R_a является RHR (roughness height rating, рейтинг высоты неровностей). Это символ на чертежах, указывающий минимальное и максимальное значения для R_a.

Среднеквадратичная шероховатость R_q Стандарты: ASME B46.1-1995, ISO 4287-1997, ISO 4287/1-1997, ГОСТ 25142-82.

Среднее значение измеренных отклонений от средней линии взятых на длине оценки

$$R_\mathrm{q} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} r_j^2}$$

Максимальная высота профиля R_t Стандарты: ASME B46.1-1995, ISO 4287-1997, ГОСТ 25142-82.

Максимальная высота от пика до пика впадины. Абсолютное значение разности между самым высоким и самым низким пиком

$$R_\mathrm{t} = \left|\min_{1\le j\le N} r_j\right| + \left|\max_{1\le j\le N} r_j\right|$$

Максимальная глубина впадины профиля R_v, R_m Стандарты: ASME B46.1-1995, ASME B46.1-1985, ISO 4287-1997, ISO 4287/1-1997, ГОСТ 25142-82.

Самая глубокая впадина. Глубина наиболее глубокой впадины на профиле шероховатости на длине оценки

$$R_\mathrm{v} = \left|\min_{1\le j\le N} r_j\right|$$

Максимальная высота пика профиля R_{p} Стандарты: ASME B46.1-1995, ASME B46.1-1985, ISO 4287-1997, ISO 4287/1-1997, ГОСТ 25142-82.

Наиболее высокий пик. Это высота наиболее высокого пика на профиле шероховатости на длине оценки

$$R_{\mathrm{p}} = \left| \max_{1 \le j \le N} r_j \right|$$

Средняя максимальная высота профиля $R_{\mathrm{t}m}$ Стандарты: ASME B46.1-1995, ISO 4287-1997, ГОСТ 25142-82.

Средняя шероховатость между пиком и впадиной. Определяется по разнице между самым высоким пиком и самой глубокой впадиной для нескольких выборок заданной длины оценки

$$R_{\mathrm{t}m} = R_{\mathrm{v}m} + R_{\mathrm{p}m}$$

где $R_{\mathrm{v}m}$ и $R_{\mathrm{p}m}$ определены ниже.

Для данных профиля она основывается на пяти базовых длинах ($m = 5$). Число выборок соответствует стандарту ISO.

Средняя максимальная глубина впадины профиля $R_{\mathrm{v}m}$ Стандарты: ISO 4287-1997.

Средняя глубина впадины основывается на одном пике на каждую базовую длину. Одна наиболее глубокая долина находится на каждой из пяти базовых длин ($m = 5$) и затем усредняется

$$R_{\mathrm{v}m} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} R_{\mathrm{v}i}$$

где

$$R_{\mathrm{v}i} = \left| \min r_j \right| \quad \text{for} \quad (i-1)\frac{N}{m} < j < i\frac{N}{m}$$

Средняя максимальная высота пика профиля $R_{\mathrm{p}m}$ Стандарты: ISO 4287-1997.

Средняя высота пика основывается на одном пике на базовую длину. По одному самому высокому пику находится на каждой из пяти базовых длин ($m = 5$) и затем усредняется

$$R_{\mathrm{p}m} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} R_{\mathrm{p}i}$$

где

$$R_{\mathrm{p}i} = \left| \max r_j \right| \quad \text{for} \quad (i-1)\frac{N}{m} < j < i\frac{N}{m}$$

Базовая глубина шероховатости R_{3z} Стандарты: ISO 4287-1997.

Расстояние между третьим по высоте пиком и третьей по глубине впадиной. Пиком называется часть поверхности выше пересечения со средней линией.

Базовая глубина профиля шероховатости $R_{3z\mathrm{ISO}}$ Стандарты: ISO 4287-1997.

Высота третьего по высоте пика относительно третьей по глубине впадины на базовой длине. Базовая глубина шероховатости определяется по пяти базовым длинам и затем усредняется.

Высота по десяти точкам R_z Стандарты: ISO 4287-1997, ГОСТ 25142-82

Среднее абсолютное значение из пяти самых высоких пиков и пяти самых глубоких впадин на длине оценки.

Средняя шероховатость профиля от пика до впадины $R_{z\mathrm{ISO}}$ Стандарты: ISO 4287-1997.

Средняя шероховатость от пика до впадины основана на одном пике и одной впадине на базовую длину. Одно наибольшее отклонение находится на пяти базовых длинах и затем усредняется. Она идентична $R_{\mathrm{t}m}$.

Функция распределения амплитуды ADF Стандарты: ISO 4287-1997.

Функция распределения амплитуды — функция вероятности, которая задаёт вероятность того, что профиль поверхности будет иметь определённую высоту z в любом произвольном его месте x.

Относительная опорная кривая BRC Стандарты: ISO 4287-1997.

Относительная опорная кривая относится к функции распределения амплитуды, это соответствующее интегральное распределение вероятности, которое гораздо чаще применяется в обработке поверхностей. Относительная опорная кривая это интеграл (сверху вниз) от функции распределения амплитуды.

Асимметрия R_{sk} Стандарты: ISO 4287-1997.

Асимметрия — параметр, который описывает форму функции распределения амплитуды. Асимметрия — простая мера асимметрии функции распределения амплитуды или, что то же самое, она показывает симметрию изменения профиля относительно его средней линии

$$R_{\mathrm{sk}} = \frac{1}{NR_q^3} \sum_{j=1}^{N} r_j^3$$

Эксцесс R_{ku} Стандарты: ISO 4287-1997.

Эксцесс — параметр, учитывающий форму функции распределения амплитуды. Эксцесс относится к равномерности функции распределения амплитуды или, что то же самое, к степени изрезанности (числу пиков) профиля.

$$R_{\mathrm{ku}} = \frac{1}{NR_q^4} \sum_{j=1}^{N} r_j^4$$

Шведская высота H Разница высоты между двумя предварительно заданными линиями. Верхняя линия оставляет открытой 5 % от поверхности и нижняя линия 90 %. Другими словами, это разница между 95м и 10м перцентилем функции распределения высоты. H менее чувствительная к выбросам данных, чем R_{t}.

4.12 Измерение особенностей

Меню Измерение содержит несколько функций для измерения характерных форм или особенностей на изображениях топографии.

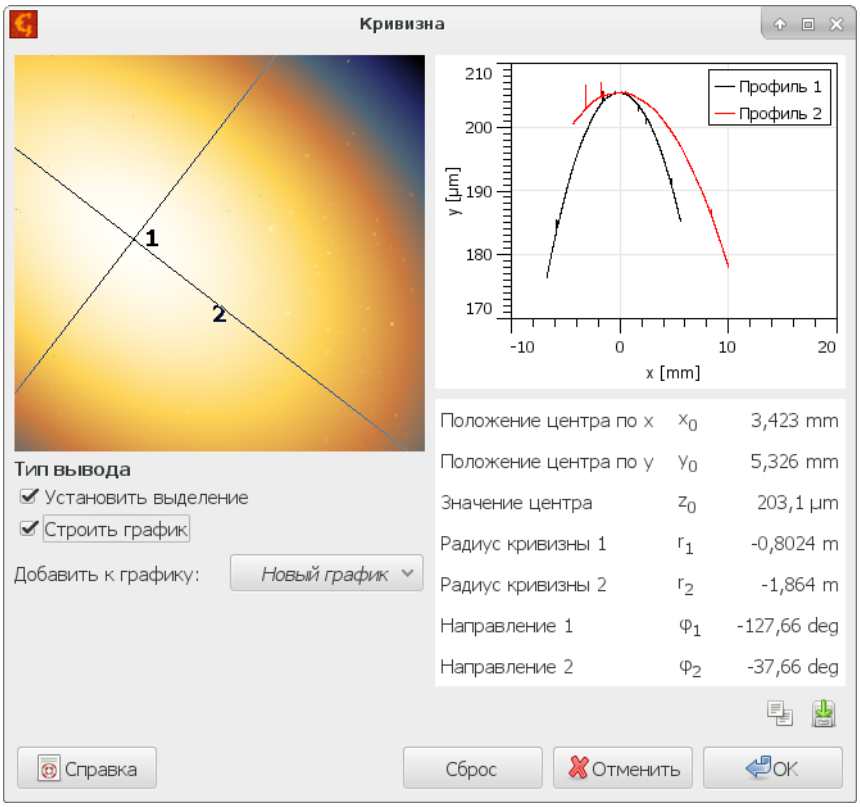
Кривизна

Обработка данных → Измерение → Кривизна

Глобальные параметры кривизны поверхности рассчитываются аппроксимацией квадратичным полиномом и определением его главных осей. Положительные знаки радиусов кривизны соответствуют вогнутой (чашеподобной) поверхности, отрицательные выпуклой (куполоподобной), смешанные знаки обозначают седловидную поверхность.

Помимо таблицы параметров, можно задать выбранные линии на данных вдоль осей аппроксимирующей квадратичной поверхности и/или напрямую считать профили вдоль них. Нулевое значение абсциссы помещается в пересечение осей.

Подобно функциям вычета фона, если на данных присутствует маска, модуль предлагает включить или исключить данные под маской.



Снимок экрана диалогового окна кривизны. показывающего сильное отклонение стеклянной пластинки с тонкой плёнкой при наличии сжимающего внутреннего напряжения.

Аппроксимировать форму

Обработка данных → Измерение → Аппроксимировать форму

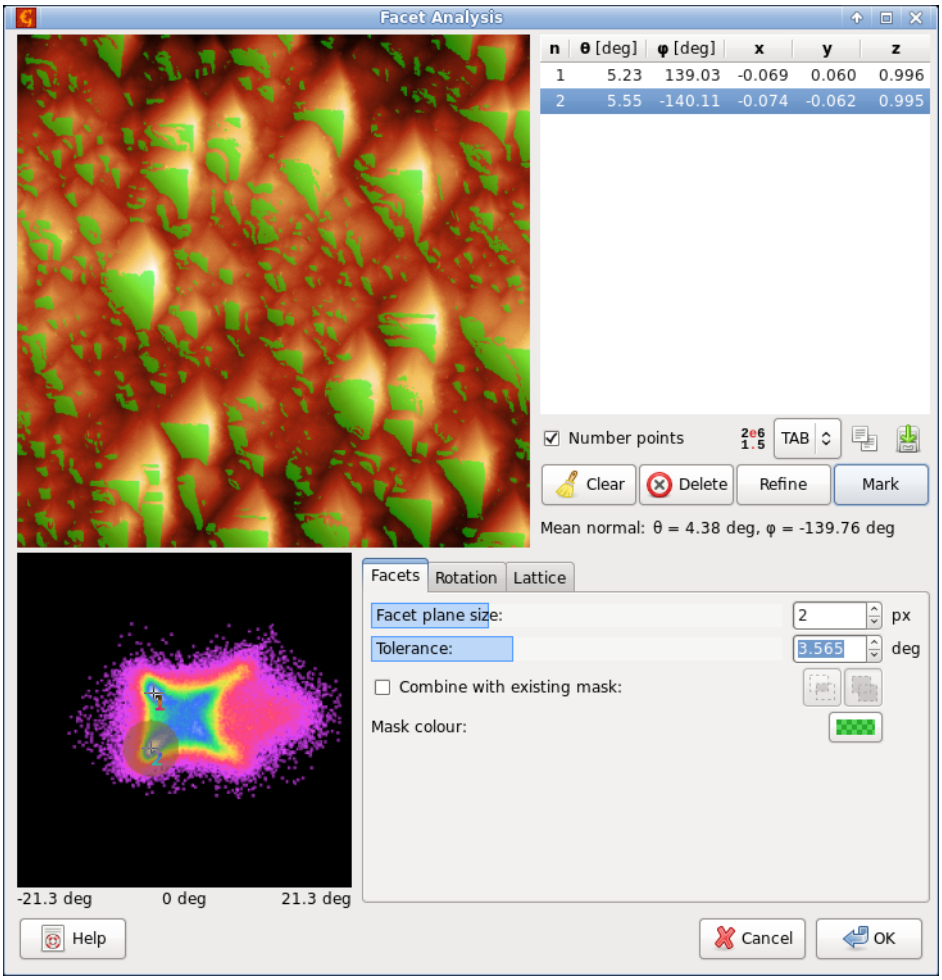
Удаление формы, а также измерение геометрических параметров можно производить путём аппроксимации данных геометрическими формами используя метод наименьших квадратов. Модуль Аппроксимировать форму практически одинаков для изображений и данных XYZ и он детально описан в разделе о работе с данными XYZ, поэтому здесь упомянуты только отличающиеся особенности.

Для изображений поддерживается стандартная работа с маской. То есть, если маска присутствует, то диалоговое окно предлагает использовать данные под маской, исключить данные под маской или игнорировать маску и использовать все данные. Поскольку исключённые пиксели могут быть выпадающими или частью изображения, не вписывающейся в заданную фигуру, можно также исключить их на изображении разности выключив переключатель Рассчитать различия для исключенных пикселей.

Анализ граней

Обработка данных → Измерение → Анализ граней

Анализ граней позволяет в интерактивном режиме изучать ориентацию граней, которые встречаются в данных и выделять грани определённой ориентации на изображении. Левое верхнее окно просмотра показывает данные с предпросмотром помеченных граней. Правое нижнее меньшее окно, ниже именуемое просмотром граней, показывает двумерное распределение наклонов.



Снимок экрана анализа граней, показывающий две выбранные точки на распределении углов и отмеченные грани для одной из них.

Центр грани всегда будет соответствовать нулевому наклону (горизонтальные грани), наклон в направлении x увеличивается в направлении левой и правой границы и наклон в направлении y увеличивается в направлении верхней и нижней границы. Точное представление координатной системы достаточно сложно (используется сохраняющее площадь преобразование между сферическими углами и плоским просмотром граней) и оно адаптируется к диапазону наклонов в конкретных отображаемых данных. Диапазон наклонов показан под изображением граней.

Точки, выбранные в окне просмотра граней, т.е. направления в пространстве, перечислены в верхнем правом углу и как углы, и как компоненты единичного вектора. Также можно выбрать направление выбранной точки нажатием в окне просмотра изображений. Направление будет установлено в соответствии с локальной гранью в этом месте изображения.

Стандартные элементы управления, которые позволяют работать со всем списком или с выбранной точкой, находятся под списком. Кнопка Уточнить пытается улучшить положение выбранной точки смещая её в локальный максимум в окне граней. Кнопка Пометить создаёт маску на изображении, соответствующую выбранному направлению и диапазону близких к нему. Направления одновременно показаны в окне просмотра граней. Средняя нормаль к выбранной области показана как Средняя нормаль внизу.

Нижняя правая часть содержит вкладки с настройками и некоторыми продвинутыми операциями.

Грань Площадь поверхности грани управляет размером (радиусом) плоскости, локально аппроксимированной в каждой точке для определения локального уклона. Специальное значение 0 соответствует случаю, когда аппроксимация плоскостью не проводится, локальный уклон определяется исходя из симметричных производных по осям x и y в каждой точке. Выбор размера окружения критически важен для получения значимого результата: он должен быть меньше, чем те особенности, которые интересуют, чтобы избежать

сглаживания, в то же время он должен быть достаточно большим чтобы подавить шум, который присутствует в изображении.

Допуск определяет диапазон направлений для выделения. Также определяет диапазон поиска для уточнения выбранного направления.

Поворот Набор выбранных направлений может быть повёрнут в пространстве используя либо управление шейдером, или путём изменения индивидуальных углов. Угол поворота вокруг вертикальной оси обозначается α и применяется первым. Направления затем поворачиваются на угол ϑ в направлении, задаваемым азимутом φ.

Глобальное вращение нельзя смешивать с движением отдельных точек в окне просмотра граней. Как только вы начали менять точки здесь, глобальное вращение сбрасывается, и текущие положения, какими бы они не были, становятся начальными положениями. В процессе вращения можно сбросить их к стартовому состоянию используя кнопку Сброс.

Решетка Набор направлений соответствующих индексам Миллера с малыми значениями может быть выбран путём выбора типа решетки, её параметров и нажатием кнопки Создать точки. Абсолютные длины граней ячейки в данном случае не важны для задания направления, влияют только их соотношения. Следовательно, они могут быть заданы в произвольных единицах.

Вместе с поворотом, эта функция может быть полезна для сопоставления граней изображения и кристаллографических плоскостей.

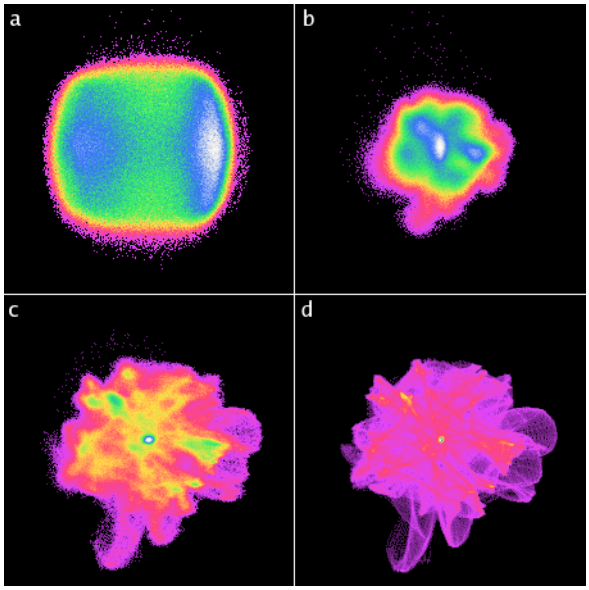


Иллюстрация влияния размера аппроксимирующей плоскости на распределение в скане расслоённого алмазоподобного покрытия со значительным тонким шумом. Можно заметить, что распределение полностью скрыто шумом при малых размерах плоскости. Размеры окружения: (a) 0, (b) 2, (c) 4, (d) 7. Шкалы углов и псевдоцвета растянуты на весь диапазон для каждого изображения, т.е. они различны для разных изображений.

Измерение граней

Обработка данных → Измерение → Измерение граней

Измерение граней позволяет интерактивно выбирать и отметить несколько граней заданной ориентации на изображении, измерить их положения и сохранить результат в таблице. Верхнее левое окно показывает данные предпросмотра выбранных граней. Меньшее нижнее левое окно, именуемое окном просмотра граней ниже, показывает двумерное распределение наклонов.

Центр грани всегда будет соответствовать нулевому наклону (горизонтальные грани), наклон в направлении x увеличивается в направлении левой и правой границы и наклон в направлении y увеличивается в направлении верхней и нижней границы. Точное представление координатной системы достаточно сложно (используется сохраняющее площадь преобразование между сферическими углами и плоским просмотром граней) и

оно адаптируется к диапазону наклонов в конкретных отображаемых данных. Диапазон наклонов показан под изображением граней.

Площадь поверхности грани управляет размером (радиусом) плоскости, локально аппроксимированной в каждой точке для определения локального уклона. Специальное значение 0 соответствует случаю, когда аппроксимация плоскостью не проводится, локальный уклон определяется исходя из симметричных производных по осям x и y в каждой точке. Выбор размера окружения критически важен для получения значимого результата: он должен быть меньше, чем те особенности, которые интересуют, чтобы избежать сглаживания, в то же время он должен быть достаточно большим чтобы подавить шум, который присутствует в изображении.

Допуск определяет диапазон направлений для выделения. Также определяет диапазон поиска для уточнения выбранного направления.

Текущая выбранная точка в окне просмотра граней (ориентации граней) показывается как Выбранные ϑ и φ. Кнопка Уточнить пытается улучшить положение выбранной точки до локального максимума в окне просмотра граней. Кнопка Пометить создаёт на изображении маску, соответствующую выбранному направлению и диапазону близких к нему. Если включена опция Мгновенное выделение граней грани выделяются сразу как только меняется выранная точка (и кнопка Пометить становится отключенной).

После того как выбор граней вас устраивает нужно нажать Измерить для того, чтобы добавить измерение к таблице ниже. Каждая строка в таблице содержит

- Индекс точки n.
- Число пикселей, помеченных и использованных в процессе измерения.
- Допуск t использованный в процессе измерения.
- Средний полярный угол ϑ нормали к грани.
- Средний азимутальный угол φ нормали к грани.
- Нормаль к грани как единичный вектор (x, y, z)
- Стандартное отклонение нормали к грани внутри заданного множества δ.

Средние нормали рассчитываются простым усреднением единичных векторов нормали $\mathbf{n}$, что является правильным если их разброс относительно мал. Стандартное отклонение рассчитывается в радианах следующим методом

$$\delta^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} |\mathbf{n}_i - \bar{\mathbf{n}}|^2$$

где чертой обозначается средняя нормаль.

Решетка

Обработка данных → Измерение → Решетка

Параметры правильных двумерных структур могут быть получены анализом данных, преобразованных в форму, которая учитывает их периодичность. Функции автокорреляции и плотности спектра мощности особенно хорошо подходят для этого, поскольку при анализе периодических структур на них присутствуют пики, соответствующие базисным векторам решеток Браве.

Пики на двумерной функции автокорреляции соответствуют векторам решетки в нормальном линейном пространстве (а также им же, умноженным в целое число раз и их линейным комбинациям). Пики на двумерной функции плотности спектра мощности соответствуют векторам обратной решетки. Матрицы, образованные векторами решетки в линейном пространстве и пространстве частот (Фурье-пространстве) являются транспонированными версиями обратных матриц друг друга. С соответствующим преобразованием любая из них может применяться для измерения периодической решетки.

Функция программы Gwyddion Измерить решетку может использовать либо функцию автокорреляции, либо ФСПМ для измерения. Поскольку правильные решетки с большими значениями периодов соответствуют далеко расположенным пикам на изображении функции автокорреляции, но близкорасположенным на ФСПМ, в этом случае лучше использовать автокорреляционную функцию для получения лучшего разрешения. Наоборот, изображение ФСПМ лучше подходит для измерения малых периодов решетки. В диалоговом окне можно свободно переключаться между линейным и Фурье-пространством и выбранная решетка по необходимости преобразуется вместе с пространством.

Если линии сканирования содержат много высокочастотного шума, горизонтальная автокорреляционная функция (средняя строка на изображении АКФ) также может оказаться достаточно шумной. В этом случае лучше интерполировать её по окружающим строкам используя опцию Интерполировать горизонтальную АКФ.

При нажатии на кнопку Оценить будет сделана попытка подобрать параметры решетки автоматически. Если полученные в результате вектора вас не устраивают, их можно выбрать на изображении вручную. Выбор можно делать либо способом, похожим на Афинное искажение (соответствует выбору Показать решетку как Решетку), либо будут показываться и настраиваться только два вектора (Вектора). Независимо от представления, когда вы приблизительно выберете положения пиков, нажатие на кнопку Уточнить подстроит вектора таким образом, чтобы они максимально точно соответствовали пикам. Кнопка Сброс может использоваться чтобы восстановить вектора во вменяемое исходное состояние.

Вектора решетки всегда показываются как вектора в линейном пространстве в виде компонент, длин и направлений. Угол, показанный как φ является углом между двумя векторами.

Векторы прямой решетки $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ соотносятся с векторами обратной решетки $\mathbf{b}_1$ и $\mathbf{b}_2$ следующим соотношением:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{R\mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot R\mathbf{a}_2}\,, \qquad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{R\mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot R\mathbf{a}_1}\,,$$

где R обозначает матрицу поворота на 90 градусов. Обратное преобразование будет похожим. Следовательно, вектора решетки всегда рассматриваются в паре. Изменение, например, $\mathbf{b}_1$ в изображении ФСПМ меняет оба вектора $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$.

Иногда бывает полезно измерить один вектор решетки, например, для изображений периодических в одном направлении структур. При этом второй вектор только мешает. Для этого существует режим одного вектора, включаемый опцией Измерить один вектор. Он прячет вторые вектора и обеспечивает параллельность векторов $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{b}_1$, и то, что их длины будут взаимно обратными, как и должно быть в данном случае.

Террасы

Обработка данных → Измерение → Террасы

Измерения террасы могут быть использованы либо для измерения шага между плоскими областями в структурах типа террас или амфитеатров, или для калибровки путем измерения таких структур с точно известной высотой ступеней – в частности атомарных ступеней в кремнии [1].

Обработка изображений состоит из нескольких частей:

1. поиска края с использованием Гауссова ступень фильтра,
2. сегментации на террасы,
3. аппроксимации изображения полиномиальным фоном, что позволяет каждой из террас быть смещенной по вертикали по разному,
4. оценки высоты ступени и целочисленных уровней отдельных террас и
5. аппроксимации изображения снова, считая заданные целочисленные уровни правильными.

Некоторые из них являются опциональными. Более того, фильтрация и сегментация являются интерактивными, в то время как аппроксимация запускается только в случае если кнопка Аппроксимировать нажата. Промежуточные результаты могут визуализироваться выбором соответствующего изображения в меню Отображать. Вначале наиболее полезным изображением обычно будет Выделенные террасы, которое показывает отдельные обнаруженные террасы разными цветами.

Параметр Ядро детекции ступеней в соответствующей стадии такой же, как для фильтра гауссовых ступеней. Следующие параметры управляют сегментацией:

Порог для детекции ступени Порог для детекции краёв (как процент от максимального значения изображения после фильтра). Слишком малые значения порога приводят к фрагментированным террасам поскольку слишком большая часть изображения рассматривается как края. Слишком большой порог приводит к слиянию террас, которые в действительности расположены на разных высотах – это проще всего проверить используя изображение Помеченные террасы.

Уширение ступени Области, распознанные как края уширяются на заданное число пикселей. Это помогает разделению террас которые должны быть раздельными. В дополнение, это исключает области слишком близкие к раям из полиномиальной аппроксимации.

Минимальная площадь террасы После разделения только достаточно большие террасы оставляются для дальнейшего анализа. Эта опция задаёт минимальную площадь террасы, как долю от всей площади изображения.

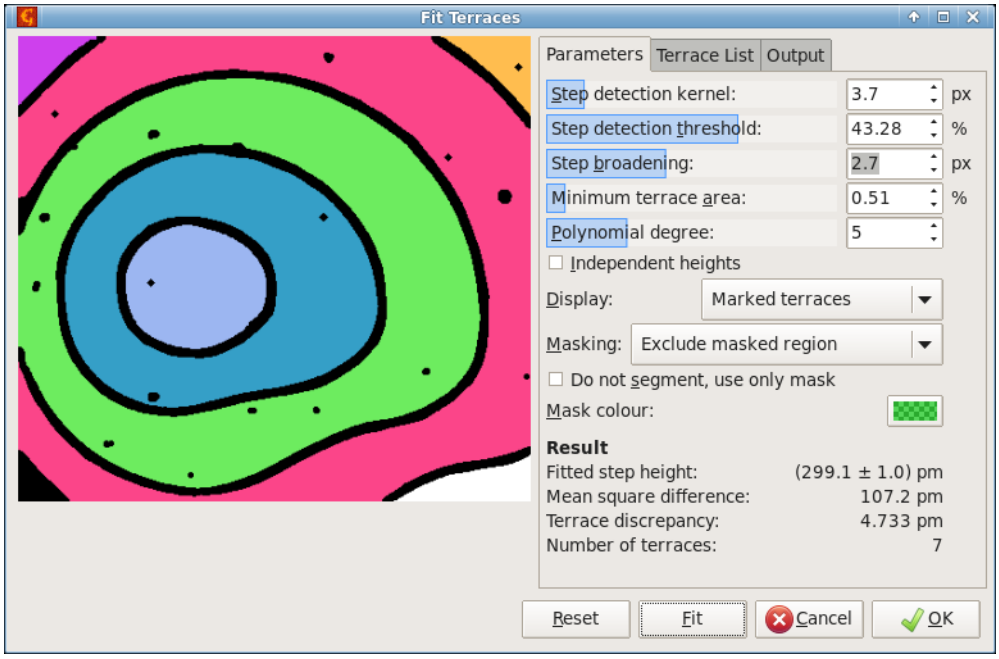
Сегментация может быть дополнена – или заменена – маской, предоставленной пользователем. Если изображение уже содержит маску, то предлагаются стандартные опции по работе с масками. Здесь Исключить область под маской означает исключение её из обнаруженных террас. Это позволяет избежать нежелательных слияний террас – например рисуя вручную небольших фрагментов границ используя инструмент редактирования маски.

Если опция Не сегментировать, использовать только маску включена, фильтрация не производится и маска напрямую используется как изображение выделенных террас (или их краёв), в зависимости от режима использования маски. Фильтрация террас по размеру будет всё равно применяться.

Общая степень двумерного полинома для аппроксимации задаётся параметром Степень полинома. Полиномиальная поверхность конструируется таким же способом, что и при выравнивании полиномом с ограниченной общей степенью, за исключение различной базовой высоты для каждой террасы.

Последующая обработка зависит от того, включена ли опция Независимые высоты. Если высоты отдельных террас независимы, каждая из обнаруженных террас может иметь произвольное смещение по высоте. Модуль не пытается аппроксимировать данные с помощью одной общей высоты ступени. Это в общем случае не очень полезно для одноатомных ступеней, которые должны иметь одну и ту же высоту, но может оказаться полезным для других разновидностей террасоподобных структур. Список террас по прежнему будет показывать оценку целочисленных уровней, которые могут быть, а могут и не быть значащими в этом случае.

Когда высоты не являются независимыми, модуль оценивает общую высоту ступени и присваивает целочисленный уровень каждой из террас – это означает, что высота любой террасы отличается от любой другой на величину, кратную общей высоте ступени. Используя начальную оценку, полиномиальная аппроксимация производится вновь, приводя к итоговому значению высоты ступени.



Снимок экрана диалогового окна измерения террас показывающего выделенные террасы для структуры амфитеатра, сформированного атомными ступенями в кремнии.

Нижняя часть вкладки Параметры показывает информацию о результатах аппроксимации:

- Аппроксимированная высота ступеньки, обычно основной результат, показанный с ошибкой измерения полученной в результате использования метода наименьших квадратов,
- Среднеквадратичная разница между данными и аппроксимацией (включая только террасы, не ступени),
- Расхождение террас, среднеквадратичная разница между действительной средней высотой террасы и её высотой как кратной высоте ступени и
- Количество террас найденных, помеченных и использованных для аппроксимации.

Вкладка Террасы содержит таблицу, уточняющую свойства отдельных террас. Каждая строка соответствует одной террасе. Столбцы представляют собой:

- n, номер террасы (и цвет на Выделенные террасы изображении),

- h, средняя высота – действительная, а не кратная высоте ступени,
- k, целочисленный уровень (который домножается на высоту ступени),
- A_{px}, площадь в пикселях,
- Δ, расхождение, т.е. разница между средней высотой и присвоенной кратной высоте ступени, и
- r, остаточная среднеквадратичная разница между аппроксимацией и данными.

Для относительно шумных данных расхождения могут быть лучшим индикатором корректной аппроксимации чем ошибки аппроксимации.

Получаемая высота ступеней слегка различается в зависимости от параметров алгоритма. Эта зависимость может быть изучена используя функцию Обзор и проводя автоматическое сканирование по диапазону степеней полинома и/или уширений ступени. Все параметры, которые не варьируются при обзоре, сохраняют значения, установленные на вкладке Параметры.

Обзор выполняется при нажатии кнопки Выполнить и может занять какое-то время. Когда он заканчивает работу, появляется окно выбора файла, которое позволяет выбрать файл, куда будет сохраняться итоговая таблица.

Ссылки

[1] J. Garnæs, D. Nečas, L. Nielsen, M. Madsen, A. Torras-Rosell, G. Zeng, P. Klapetek, A. Yacoot, Algorithms for using silicon steps for scanning probe microscope evaluation. Metrologia 57 (2020) 064002, doi:10.1088/1681-7575/ab9ad3

4.13 Анализ зёрен

В Gwyddion реализовано несколько алгоритмов для работы с зёрнами. Прежде всего, можно использовать простые пороговые алгоритмы (порог по высоте, наклону и кривизне). Эти процедуры могут быть очень эффективны для анализа частиц (чтобы пометить частицы лежащие на ровной поверхности).

По порогу

Обработка данных → Зёрна → Пометить по порогу

Выделение по порогу это основной метод выделения зёрен. В этом модуле реализованы пороги по высоте, наклону и кривизне. Результаты отдельных пороговых методов можно объединять вместе используя логические операторы.

Метод Оцу

Обработка данных → Зёрна → Пометить по методу Оцу

Автоматический метод Оцу выделения зёрен по порогу классифицирует значения данных в два класса, минимизируя дисперсию внутри класса для обоих. Метод хорошо подходит для изображений, которые содержат два относительно хорошо определённых диапазона значений.

Пометить по краю

Обработка данных → Зёрна → Пометить по краю

Другой вариант функции выделения зёрен основан на обнаружении краёв (локальной кривизне функции высоты). Изображение обрабатывается фильтром «разница гауссианов\quote> »

Удалить у границы

Обработка данных → Зёрна → Удалить у границы

Зёрна, которые касаются границ изображения, можно удалить используя эту функцию. Это может быть полезно в том случае, когда эти зёрна нужно рассматривать как неполные и их нужно исключить из анализа. Некоторые другие функции, которые можно использовать для модификации формы зерён после их выделения, вызываются из инструмента Редактор маски.

Пометить по водоразделу

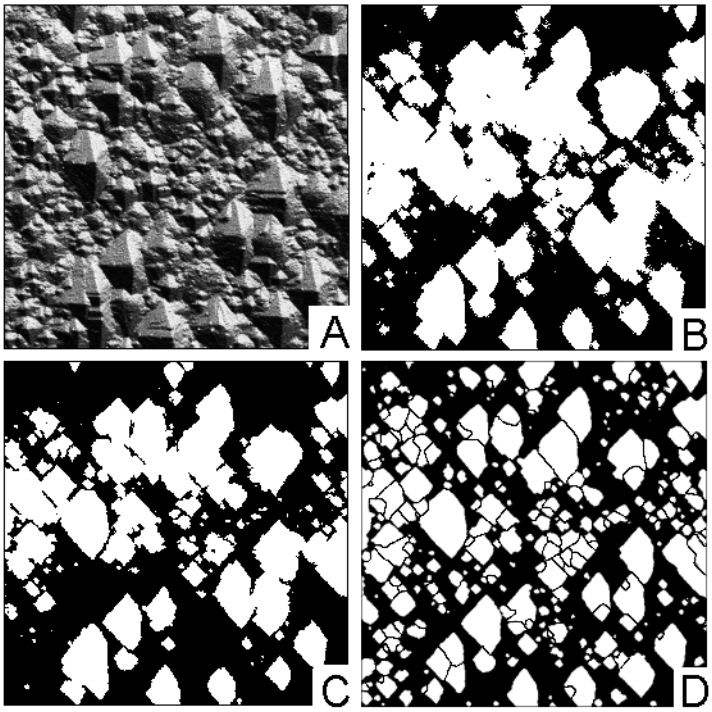
Обработка данных → Зёрна → Пометить по водоразделу

Для более сложных структур данных эффективность пороговых алгоритмов может оказаться весьма плохой. Для этих данных выделение зёрен или частиц более эффективно можно проводить с помощью алгоритма водораздела.

Алгоритм водораздела обычно задействуется для определения локальных минимумов и разделения изображения на сегменты в обработке изображений. Поскольку проблема определения положения зёрен может сводиться к проблеме нахождения локальных экстремумов на поверхности, этот алгоритм также можно использовать для нужд разделения и выделения зёрен. Для удобства в дальнейшем мы будем считать данные инвертированными в направлении z при описании этого алгоритма (т.е. вершины зёрен формируют локальные минимумы в нижеследующем тексте). Мы применяем две стадии анализа зёрен (см. [1]):

1. Фаза обнаружения зёрен: В каждой точке инвертированной поверхности помещается виртуальная капля воды (количество воды регулируется параметром Размер капли). В случае, если капля не находится в локальном минимуме, она следует по пути наискорейшего спуска чтобы минимизировать свою потенциальную энергию. Как только капля достигает любого локального минимума, она остаётся там и покоится на поверхности. Подобным образом она частично заполняет объём локального минимума (см. рисунок ниже и его подпись). Этот процесс повторяется несколько раз (параметр Число шагов). В результате получается система водоёмов различного размера, заполняющих впадины в инвертированной поверхности. После этого рассчитывается площадь каждого водоёма и наименьшие из них отбрасываются в предположении, что они формируются в локальных минимумах, образованных шумом (все водоёмы размером меньше, чем задано параметром Порог, удаляются). Большие водоёмы используются для определения положения зёрен для разделения на следующем шаге. Подобным образом можно устранить шум на данных АСМ.
2. Фаза разделения: Зёрна, найденные на первом шаге, помечаются (каждое своим уникальным номером). Капли воды продолжают падать на поверхность и заполнять локальные минимумы (количество воды регулируется параметром Размер капли). Общее число шагов падения капли в каждую точку поверхности регулируется параметром Число шагов. Поскольку зёрна уже обнаружены и помечены после первого шага, следующие пять ситуаций возможны после достижения каплей локального минимума.
   (a) Капля достигла места, ранее отмеченного как определённое зерно. В этом случае капля объединяется с зерном, т.е. помечается как часть того же зерна.
   (b) Капля достигла места, где нет зерна, но отмеченное зерно найдено в ближайшей окрестности капли. В этом случае капля снова объединяется с зерном.
   (c) Капля достигла места, где нет зёрен, и при этом зёрен не было даже в ближайшей окрестности капли. В этом случае капля никак не помечается.
   (d) Капля достигла места, где нет зерна, но более одного отмеченного зерна найдено в ближайшей окрестности. (т.е. в окрестности нашлось два разных зерна). В этом случае капля помечается как граница зерна.
   (e) Капля достигла места, помеченного как граница зерна. В этом случае капля также помечается как граница зерна.

Таким путём мы определяем положения отдельных зёрен и затем определяем объём, занятый каждым зерном по отдельности. Если нас интересуют на поверхности не зёрна (выпуклости), а долины (впадины), можно использовать параметр Инвертировать высоту.



Изображение зернистой структуры поверхности (a) и соответствующие результаты порога по высоте (b), кривизне (c), и алгоритма водораздела (d). С помощью алгоритма водораздела можно разделить изображение на сегменты даже лучше.

Сегментация

Обработка данных → Зёрна → Пометить сегментацией

Эта функция реализует другой подход, основанный на алгоритме водораздела, в данном случае классический алгоритм Винсента для водораздела в цифровых пространствах [2], который применяется к предобработанному изображению. В общем случае результатом будет изображение, полностью сегментированное на фрагменты, каждый пиксель либо принадлежит фрагменту, либо разделяет два соседних. По умолчанию алгоритм помечает впадины. Чтобы пометить направленные вверх зёрна, что встечается чаще на изображениях АСМ, можно использовать опцию Инвертировать высоту.

Для предобработки доступны следующие параметры:

Гауссово сглаживание Дисперсия гауссова сглаживающего фильтра, применяемого к изображению. Нулевое значение соответствует отсутствию сглаживания.

Добавить градиент Относительный вес локального градиента, добавленного к данным. Большие значения соответствуют тому, что области с большими локальными уклонами будут стремиться стать границами зёрен.

Добавить кривизну Относительный вес локальной кривизны, добавленной к данным. Большие значения соответствуют тому, что локальные вогнутые области будут стремиться стать границами зёрен.

Высота барьера Относительный уровень высоты, выше которого пиксели никогда не присваиваются к любому из зёрен. Если не выставлено в 100%, эта настройка создаёт исключение для свойства полной сегментации.

Уровень предзаполнения Относительный уровень высоты, до которого поверхность предзаполняется, затирая любые детали на дне глубоких впадин.

Предварительно заполнять с минимумов Относительный уровень высоты, до которого поверхность предзаполняется из каждого локального минимума, затирая любые детали на дне впадин.

Логистическая регрессия

Обработка данных → Зёрна → Логистическая регрессия

Для того, чтобы перенести сегментацию с одного изображения на другое похожее, или с более мелкого фрагмента на полное большое изображение можно использовать модуль логистической регрессии. У модуля есть два режима работы, в режиме обучения ему нужна маска зёрен, которая должна присутствовать на изображении, и он обучает логистическую регрессию для этой маски. После обучения можно использовать этот модуль для выделения зёрен на новых изображениях. В обоих режимах работы модуль создаёт вектор признаков для каждой точки из точек текущего изображения, применяя к нему набор различных фильтров. На данный момент доступны следующие признаки:

Гауссово размытие Гауссовы фильтры с длиной в 2, 4, 8 и т.д. пикселей. Число гауссовых фильтров может быть выбрано с помощью опции Число гауссиан.

Производные Собеля Фильтры первых производных Собеля для направлений X и Y.

Лапласиан Оператор Лапласа (суммы вторых производных).

Гессиан три элемента матрицы вторых производных Гесса, по одной, реализующей двойное дифференцирование по направлениям X и Y и один со смешанной производной (поскольку диагональные элементы должны быть равны в данном случае).

Все фильтры производных если их выбрать применяются как к оригинальному изображению, так и к каждому из уровней сглаживания гауссовыми фильтрами, если они включены. Каждый из слоёв признаков считается с помощью оператора свёртки и после этого нормализуется.

Параметр регуляризации позволяет регуляризовать логистическую регрессию, большее значение означает, что параметры регрессии более ограничены и не могут принимать очень большие значения.

Следует отметить, что для начала обучения необходима маска интересующих особенностей (зёрен) на исходном изображении, или в результате обучения получится нулевой результат. Фаза обучения может быть очень медленной и требовательной к памяти, особенно для больших изображений и большого числа признаков. Результаты обучения сохраняются между вызовами функции и могут применяться к новым изображениям. Если набор признаков меняется, то необходимо обучать регрессию заново с нуля.

Статистика

Свойства зёрен можно изучать с помощью нескольких функций. Простейшей из них является сводная информация о зёрнах

Сводная информация о зёрнах

Обработка данных → Зёрна → Сводная информация

Эта функция рассчитывает общее число помеченных зёрен, их общую площадь (площадь проекции) как в виде абсолютного значения, так и в виде доли общей площади поля данных, общий объём зёрен, общую длину границ зёрен, среднюю площадь и сторону эквивалентного квадрата для отдельного зерна. Средний размер рассчитывается усреднением стороны эквивалентного квадрата, и его квадрат в общем случае не будет равным средней площади.

Общие характеристики области под маской могут быть получены с помощью инструмента «статистические величины» когда включена опция Использовать маску. Если инвертировать маску та же информация может быть получена об областях вне зёрен.

Статистика

Обработка данных → Зёрна → Статистика

Функция статистики зёрен показывает среднее, срединное, стандартное отклонение (среднеквадратичное) и межквартильный диапазон для всех доступных свойств зёрен в одной таблице.

Распределения зёрен

Обработка данных → Зёрна → Распределения

Распределения зёрен является наиболее мощным и сложным инструментом. Он работает в двух режимах: построение графиков и экспорт необработанных данных. В режиме построения графиков выбранные характеристики отдельных зёрен, рассчитываются, собираются, и строятся в виде суммарных графиков, показывающих их распределения.

Экспорт необработанных данных полезен для экспертов, которым нужно, например, рассчитывать корреляцию характеристик отдельных зёрен. В этом режиме выбранные характеристики зёрен рассчитываются и записываются в виде таблицы в текстовый файл, где каждая строка соответствует отдельному зерну, а столбцы соответствуют выбранным величинам. Порядок следования столбцов тот же, что и порядок следования величин в диалоговом окне; все величины записывается в единицах измерения СИ, что является общепринятым в Gwyddion.

Корреляция свойств зёрен

Обработка данных → Зёрна → Коррелировать

Корреляция зёрен строит график одной выбранной величины зёрен как функцию другой величины, показывая корреляции между ними.

Инструмент измерения зёрен

Инструмент измерения зёрен является интерактивным способом получения той же информации об отдельных зёрнах, что и Распределения зёрен в режиме экспорта необработанных данных. После выбора зерна мышью в окне данных, все доступные величины показываются в окне инструмента.

Помимо физических характеристик, этот инструмент также показывает номер зерна. Номера зёрен соответствуют номерам строк (начиная с 1) в файлах, экспортированных инструментом распределений зёрен.

Свойства зёрен

Инструменты распределений зёрен и измерения зёрен могут рассчитывать следующие свойства зёрен:

Свойства значений

- Минимум, минимальное значение (высота), найденное внутри зерна.
- Максимум, максимальное значение (высота), найденное внутри зерна.
- Среднее, среднее всех значений внутри зерна, средняя высота зерна.
- Срединное, срединное всех значений внутри зерна, срединная высота зерна.
- Ср. квадр., стандартное отклонение для всех значений, встретившихся внутри зерна.
- Минимум на границе, минимальное значение (высота) найденное на внутренней границе зерна, т.е. внутри множества точек, лежащих внутри зерна, но по крайней мере одна из соседних точек которых лежит вне зерна.
- Максимум на границе, максимальное значение (высота) найденное на внутренней границе зерна, т.е. внутри множества точек, лежащих внутри зерна, но по крайней мере одна из соседних точек которых лежит вне зерна.

Свойства площадей

- Площадь проекции, площадь проекции зерна на плоскость.
- Сторона эквивалентного квадрата, сторона квадрата с той же площадью проекции, что и у зерна.
- Радиус эквивалентного диска, радиус диска с той же площадью проекции, что и у зерна.
- Площадь поверхности, площадь поверхности зерна, см. раздел статистические величины для описания метода оценки площади поверхности.
- Площадь выпуклой оболочки, площадь проекции выпуклой оболочки зерна. Площадь выпуклой оболочки несколько больше площади зерна даже для достаточно выпуклых зёрен вследствие пикселизации маски. Точно такую же площадь зерна, как и площадь проекции выпуклой оболочки, будут иметь только зёрна в виде прямоугольников.

Свойства границы

- Длина границы проекции, длина проекции границы зерна на горизонтальную плоскость (а не на реальную трёхмерную поверхность). Метод оценки длины границы описан ниже.
- Минимальный ограничивающий размер, минимальный размер зерна в горизонтальной плоскости. Может быть показан как минимальная ширина зазора в горизонтальной плоскости, через который может пройти зерно.
- Направление минимального ограничивающего размера, направление зазора из описания предыдущей величины. Если зерно обладает симметрией, при которой таких направлений несколько, выбирается одно из них.

- Максимальный ограничивающий размер, максимальный размер зерна в горизонтальной плоскости. Может быть показан как максимальная ширина зазора в горизонтальной плоскости, который можно заполнить зерном.
- Направление максимального ограничивающего размера, направление зазора из описания предыдущей величины. Если зерно обладает симметрией, при которой таких направлений несколько, выбирается одно из них.
- Максимальный радиус вписанного диска, радиус максимального диска, который помещается внутри зерна. Должен поместиться полный диск, а не ограничивающая его окружность, что имеет значение для зёрен с пустотами внутри. Можно использовать Инструмент редактирования маски чтобы заполнить пустоты в зёрнах и избавиться от них.
- Положение центра по x максимального вписанного диска, горизонтальная координата центра максимального вписанного диска. Точнее, одного такого диска, если он не уникален.
- Положение центра по y максимального вписанного диска, вертикальная координата центра максимального вписанного диска. Точнее, одного такого диска, если их несколько, и того же, что и у предыдущего элемента.
- Минимальный радиус описанной окружности, радиус минимальной окружности, целиком содержащей зерно.
- Положение центра по x минимальной описанной окружности, горизонтальная координата центра минимальной описанной окружности.
- Положение центра по y минимальной описанной окружности, вертикальная координата центра минимальной описанной окружности.
- Средний радиус, среднее расстояние от центра масс зерна до его границы. Это свойство в основном имеет смысл только для выпуклых или почти выпуклых зёрен.
- Минимальный диаметр Мартина, минимальная длина срединной линии, проходящей через зерно.
- Направление минимального диаметра Мартина, направление линии из предыдущего пункта. Если у зерна проявляется симметрия и таких направлений несколько, то из них произвольно выбирается одно.
- Максимальный диаметр Мартина, максимальная длина срединной линии, проходящей через зерно.
- Направление максимального диаметра Мартина, направление линии из предыдущего пункта. Если у зерна проявляется симметрия и таких направлений несколько, то из них произвольно выбирается одно.

Свойства объёмов

- Объём между нулевой плоскостью и поверхностью, объём между поверхностью зерна и плоскостью $z = 0$. Значения ниже нуля формируют отрицательные объёмы. Уровень нуля должен быть установлен на разумное значение чтобы получать вменяемые результаты (нередко достаточно Исправить нуль), что является достоинством этого метода: можно использовать базисную плоскость по выбору.
- Объём между поверхностью и плоскостью, проходящей через минимум, объём между поверхностью зерна и плоскостью $z = z_{\min}$, где $z_{\min}$ - минимальное значение (высота), найденное внутри зерна. Этот метод учитывает окружающую зерно поверхность, но обычно недооценивает объём, особенно для малых зёрен.
- Объём между поверхностью и фоном, вычисленным по Лапласу, объём между поверхностью зерна и базовой поверхностью, образованной интерполяцией окружающей зерно поверхности по Лапласу. Другими словами, это объём. который исчезнет после использования инструментов Интерполировать данные под маской или удаления зёрен с лапласовой интерполяцией зерна. Это один из наиболее сложных методов, с другой стороны его результаты труднее всего предугадать.

Свойства расположения

- Положение центра по x, горизонтальная координата центра зерна. Поскольку площадь зерна определяется как площадь под соответствующими точками маски, центр зерна размером с пиксель будет иметь полуцелые координаты, не целые. Смещение начала координат поля данных учитывается (если оно есть).
- Положение центра по y, вертикальная координата центра зерна. Интерпретация описана выше.

Свойства наклонов

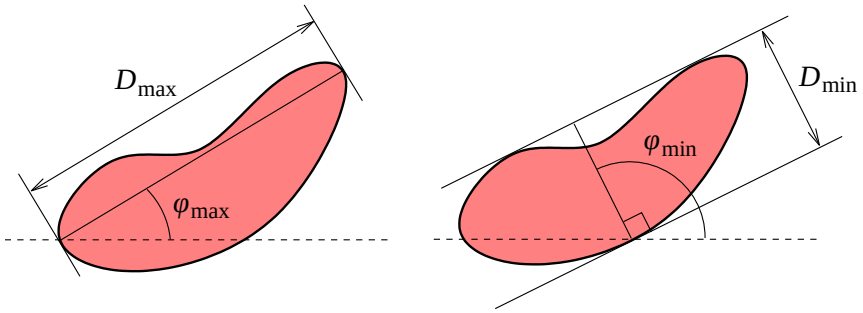
- Наклон ϑ, отклонение нормали к средней плоскости от оси z, см. описание функции Наклоны для более подробной информации.
- Наклон φ, азимут наклона, как он был задан в определении функции Наклоны.

Свойства, относящиеся к кривизне

- Центр кривизны по x, горизонтальное положение центра квадратичной поверхности, которой аппроксимируется поверхность зерна.
- Центр кривизны по y, вертикальное положение центра квадратичной поверхности, которой аппроксимируется поверхность зерна.
- Центр кривизны по z, значение в центре квадратичной поверхности, которой аппроксимируется поверхность зерна. Следует отметить, что это значение на аппроксимирующей поверхности, не на поверхности зерна.
- Кривизна 1, меньшая кривизна (т.е. значение, обратное радиусу кривизны) в центре.
- Кривизна 2, большая кривизна (т.е. значение, обратное радиусу кривизны) в центре.
- Угол кривизны 1, направление, соответствующее радиусу Кривизна 1.
- Угол кривизны 2, направление, соответствующее радиусу Кривизна 2.

Свойства, относящиеся к моментам

- Большая полуось эквивалентного эллипса, длина большей полуоси эллипса, у которого будет такой же угловой момент второго порядка в горизонтальной плоскости.
- Малая полуось эквивалентного эллипса, длина меньшей полуоси эллипса, у которого будет такой же угловой момент второго порядка в горизонтальной плоскости.
- Ориентация эквивалентного эллипса, направление большей полуоси эллипса, у которого будет такой же угловой момент второго порядка в горизонтальной плоскости. Для круглого зерна, этот угол устанавливается в ноль по определению.

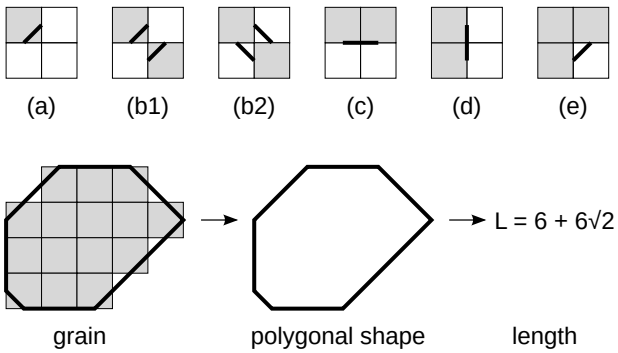


Максимальные и минимальные ограничивающие размеры зерна.

Длина границы зерна оценивается путём суммирования оценочного вклада каждой комбинации из четырёх точек границы. Вклады показаны на следующем рисунке для каждого вида конфигурации, где h_x и h_y - размеры пикселей вдоль соответствующих осей и h - длина диагонали пикселя:

$$h = \sqrt{h_x^2 + h_y^2}$$

Вклады соответствуют один в один длинам сегментов границы многоугольника, которым аппроксимируется форма зерна. Построение эквивалентной формы многоугольника также показано на этом рисунке.



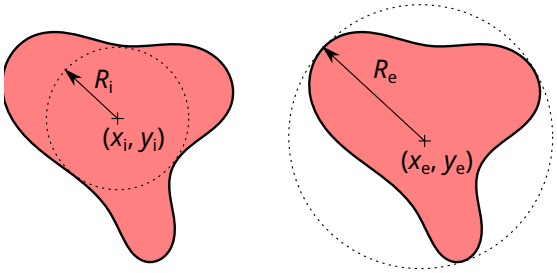
Вклад конфигураций пикселей в оцениваемую длину поверхности (сверху). Серые квадраты представляют пиксели внутри зерна, белые - внешние пиксели. Оценочный вклад каждой конфигурации: (a) $h/2$, (b1), (b2) h, (c) h_y, (d) h_x, (e) $h/2$. Случаи (b1) и (b2) отличаются только формой сегментов-многоугольников, оценочные длины поверхности одинаковы. Нижняя часть рисунка показывает, как сегменты объединяются, чтобы образовать многоугольник.

Объём зерна после вычета основания, оценивается как объём точно такой же фигуры, верхняя поверхность которой использовалась для расчёта площади поверхности. Следует отметить, что для объёма, ограниченного многогранником, метод эквивалентен классическому двумерному методу интегрирования с помощью трапеций. Однако, мы рассчитываем объём под маской с центрами на гранях фигуры, поэтому их вклад в интеграл распределён иначе, как показано на рисунке ниже.

$\frac{1}{96}$	$\frac{5}{48}$	$\frac{1}{96}$
$\frac{5}{48}$	$\frac{13}{24}$	$\frac{5}{48}$
$\frac{1}{96}$	$\frac{5}{48}$	$\frac{1}{96}$

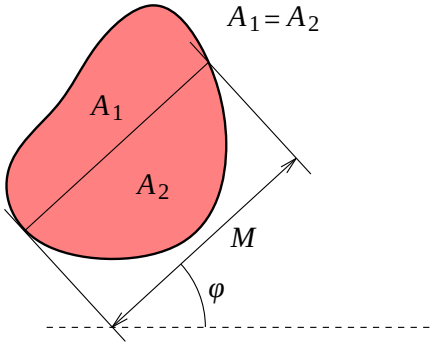
Вклад отдельных пикселей в объём одного пикселя (серого).

Относящиеся к кривизне значения для отдельных зёрен считаются так же, как и общая кривизна, рассчитываемая функцией Кривизна. См. описание функции для более подробной информации.



Максимальный вписанный диск и минимальная описанная окружность зерна.

Вписанные диски и описанные окружности зёрен можно визуализировать используя функции Обработка данных → Зёрна → Выбрать вписанные диски и Обработка данных → Зёрна → Выбрать описанные окружности. Эти функции создают круговые выделенные области, представляющие соответствующие диски или окружности для каждого зерна. которые затем можно показать с помощью инструмента Менеджер выделенных областей.



Определение диаметра Мартина для заданного угла.

Диаметр Мартина это длина особой линии, проходящей через зерно в заданном направлении, которая делит площадь зерна на две равные части (срединная линия). Эта величина в основном полезна для зёрен которые являются более или менее выпуклыми. Для справки мы должны отметить, что если зерно является сильно не-выпуклым и срединная линия пересекает его несколько раз, Gwyddion суммирует длины сегментов, которые лежат внутри зерна (другим вариантом могло бы быть просто взять расстояние между первым и последним пересечением).

Фильтр зёрен

Помеченные зёрна можно фильтровать по порогу любой из доступных для зёрен величин используя меню Обработка данных → Зёрна → Фильтр. Этот модуль можно использовать для основных операций, таких как удаление слишком мелких зёрен используя порог площади в пикселях, а также для сложной фильтрации, использующей логические операции над несколькими величинами, относящимися к параметрам зёрен.

Фильтр сохраняет зёрна, которые удовлетворяют условию, заданному как Оставлять зёрна, удовлетворяющие и удаляет все остальные. Условие задаётся как логическое выражение, содержащее от одного до трёх пороговых условий, обозначенных как A, B и C. Простейшее условие это просто A, означающее, что величина A должна лежать между заданными порогами.

Каждое условие состоит из верхнего и нижнего порога для одной величины, относящейся к зёрнам, например, площади в пикселях или значению минимума. Значения должны лежать в диапазоне [нижний,верхний] чтобы удовлетворить условию и тем самым сохранить это зерно. Следует отметить, что можно выбрать нижний порог больше верхнего. В этом случае условие инвертируется, т.е. зерно сохраняется если значение лежит вне диапазона [нижний,верхний].

Отдельные величины для зёрен присваиваются A, B и C выбором величины из списка и нажатием на соответствующую кнопку в Установить выбранное как. Текущий выбранный набор величин показан в заголовках Условие A, Условие B и Условие C.

Извлечение номеров зёрен

Обработка данных → Зёрна → Извлечь номера

Когда изображения с выделенными зёрнами в дальнейшем обрабатываются в другом программном обеспечении, может оказаться полезным в явном виде определь какой номер зерна присвоен какой области в Gwyddion. Эта функция создаёт избражение, где каждый пиксель содержит соответствующий номер зерна. Следовательно, хотя данные при этом по прежнему будут представлены вещественными числами, они будут на самом деле целыми.

Выравнивание зёрен

Зёрна можно выровнять по вертикали используя функцию Обработка данных → Зёрна → Выровнять зёрна. Эта функция сдвигает каждое зерно таким образом, чтобы сделать одну из связанных с высотой величин всех зёрен одинаковой. Обычно выравниваются минимальные значения внутри зерна, но возможны другие варианты.

Данные между зёрнами также сдвигаются по вертикали. Эти сдвиги интерполируются из сдвигов зёрен используя уравнение Лапласа, что приводит к плавным переходам сдвигов между зёрнами (хотя и не принимая во внимания другие особенности поверхности).

Источники

[1] P. Klapetek, I. Ohlídal, D. Franta, A. Montaigne-Ramil, A. Bonanni, D. Stifter, H. Sitter: Atomic force microscopy characterization of ZnTe epitaxial films. Acta Physica Slovaca 53 (2003) 223–230, doi:10.1143/JJAP.42.4706

[2] Luc Vincent and Pierre Soille: Watersheds in digital spaces: an efficient algorithm based on immersion simulations. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 13 (1991) 583–598, doi:10.1109/34.87344

4.14 Преобразование Фурье

Двумерное преобразование Фурье доступно в меню Обработка данных → Интегральные преобразования → 2D БПФ, где реализовано быстрое преобразование Фурье (БПФ, FFT). Преобразование Фурье раскладывает сигнал на его гармонические составляющие, и, таким образом, его можно использовать при изучении спектральных частот, присутствующих в данных СЗМ.

Модуль 2D БПФ предлагает несколько вариантов вывода данных:

- Модуль — абсолютное значение комплексного коэффициента Фурье, пропорциональное квадратному корню функции спектральной плотности мощности (ФСПМ).
- Фаза — фаза комплексного коэффициента (используется редко).
- Действительное — действительная часть комплексного коэффициента.

- Мнимое — мнимая часть комплексного коэффициента.

и некоторые их сочетания для удобства.

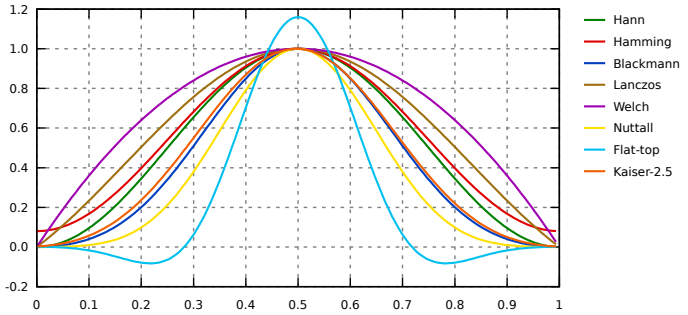
Радиальные сечения двумерной ФСПМ можно удобно получить с помощью операции 2D PSDF. Несколько других функций, рассчитывающих спектральные плотности описаны в разделе Статистический анализ. Также возможно фильтровать изображения в частотном представлении (Фурье-пространстве) используя одномерный или двумерный фильтры на основе быстрого преобразования Фурье (БПФ) или простое разделение частот.

Для не зависящего от масштаба и поворота сравнения текстур может оказаться полезным преобразовать ФСПМ из декартовых координат частот в координаты, состоящие из логарифма пространственной частоты и её направления. Масштабирование и поворот в новых координатах становятся простыми смещениями. Функция Обработка данных → Статистика → Log-Phi ФСПМ непосредственно расчитывает преобразованную ФСПМ. Безразмерная горизонтальная координата это угол (от 0 до 2π), вертикальная это логарифм частоты. Также возможно сгладить ФСПМ гауссовым фильтром заданной ширины перед преобразованием.

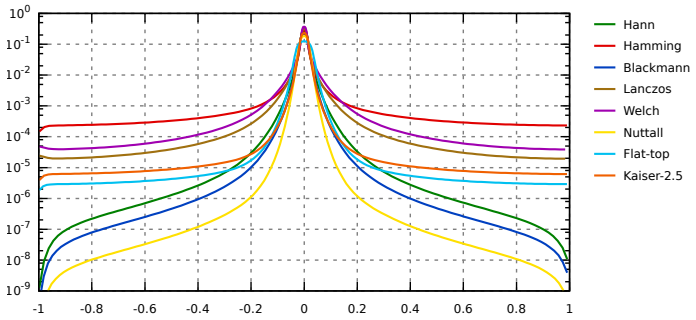
Следует отметить, что преобразование Фурье считает данные бесконечно протяженными, и, следовательно, накладывает некоторые периодические граничные условия. Поскольку реальные данные не обладают этими свойствами, необходимо использовать некоторую оконную функцию для подавления данных на границах изображения. Если вы этого не сделаете, БПФ будет считать данные обработанными прямоугольной функцией окна, которая имеет действительно скверный Фурье-образ, что приводит к искажению Фурье-спектра.

Gwyddion предлагает на выбор несколько функций окна. Большинство из них образовано набором синусов и косинусов, которые корректно приглушают данные на краях. В следующей таблице формул для функций окна независимая переменная x лежит в диапазоне $[0,1]$, что соответствует нормализации абсциссы; для простоты переменная $\xi = 2\pi x$ используется в ряде формул. Доступные виды оконных функций включают в себя:

Название	Формула
Нет	1
Прямоугольное	0.5 в граничных точках, 1 во всех остальных
Ханн	$w_{\mathrm{Hann}}(x) = 0.5 - 0.5\cos\xi$
Хэмминг	$w_{\mathrm{Hamming}}(x) = 0.54 - 0.46\cos\xi$
Блэкмен	$w_{\mathrm{Blackmann}}(x) = 0.42 - 0.5\cos\xi + 0.08\cos 2\xi$
Ланцош	$w_{\mathrm{Lanczos}}(x) = \operatorname{sinc}\pi(2x-1)$
Велч	$w_{\mathrm{Welch}}(x) = 4x(1-x)$
Наттолл	$w_{\mathrm{Nutall}}(x) = 0.355768 - 0.487396\cos\xi + 0.144232\cos 2\xi - 0.012604\cos 3\xi$
Плоская вершина	$w_{\mathrm{flattop}}(x) = 0.25 - 0.4825\cos\xi + 0.3225\cos 2\xi - 0.097\cos 3\xi + 0.008\cos 4\xi$
Кайзер α	$w_{\mathrm{Kaiser},\alpha}(x) = \dfrac{\mathrm{I}_0\left(\pi\alpha\sqrt{4x(1-x)}\right)}{\mathrm{I}_0(\pi\alpha)}$, где I_0 — модифицированная функция Бесселя нулевого порядка и α — параметр.



Оконные функции: Ханна, Хэмминга, Блэкмена, Ланцоша, Велча, Наттола, с плоской вершиной, Кайзера 2,5.



Огибающие частотного отклика оконных функций: Ханна, Хэмминга, Блэкмена, Ланцоша, Велча, Наттола, с плоской вершиной, Кайзера 2,5.

Одномерная фильтрация БПФ

Обработка данных → Исправить данные → Одномерная фильтрация БПФ

Одним из наиболее удачных способов удаления шума на определённых частотах из изображения является Фурье-фильтрация. Сначала вычисляется прямое преобразование Фурье изображения. Затем к результату преобразования применяется фильтр. После этого обратное преобразование используется для получения отфильтрованного изображения. Gwyddion использует быстрое преобразование Фурье (БПФ или FFT) для существенного ускорения этого большого расчёта.

При использовании одномерного фильтра БПФ частоты, которые должны быть удалены со спектра (тип подавления: убрать) или подавлены до значения соседних частот (тип подавления: выровнять), могут быть выбраны отметкой нужных областей на графике спектра мощности. Выбранная область может быть легко инвертирована использованием опции "тип фильтра". Одномерная фильтрация БПФ может использоваться как для горизонтального, так и для вертикального направления.

Двумерная фильтрация БПФ

Обработка данных → Исправить данные → Двумерный фильтр БПФ

Двумерная фильтрация БПФ работает подобно одномерному варианту (см. выше), но использует двумерное преобразование Фурье. Следовательно, пространственные частоты, которые нужно отфильтровать должны быть выбраны в двумерном пространстве с использованием редактора маски. Поскольку частоты измеряются относительно центра изображения (который соответствует нулевой частоте), маску можно прикрепить к центру (началу координат) в процессе редактирования. Также доступны различные режимы отображения и вывода результата, которые не требуют разъяснений – модуль может выводить изображение или коэффициенты БПФ (или оба).

Разделение частот

Обработка данных → Выравнивание → Разделение частот

Простой альтернативой двумерной фильтрации с помощью БПФ будет разделение изображение на составляющие с низкими и высокими пространственными частотами используя простые фильтры нижних и верхних частот. В зависимости от выбранной опции тип вывода модуль разделения частот может создавать либо низкочастотное, либо высокочастотное изображение, либо оба

Порог задаёт пространственную частоту, которая показывается как относительная доля частоты Найквиста и также как соответствующая пространственная длина волны. Если Ширина пороговой функции задаётся нулевой, фильтр будет иметь узкий порог частоты. Для ненулевых значений переход будет иметь форму функции ошибки erf с заданной шириной.

Фильтрация в частотной области может приводить к артефактам вдоль границ изображения. Вследствие этого модуль предлагает несколько вариантов работы с граничной областью помимо варианта Нет, который годится только для периодических данных (или другим способом непрерывных при переходе через границу изображения). По Лапласу и Зеркально расширяют изображение решением уравнения Лапласа или зеркальным отображением, соответственно, точно таким же способом, как и функция Расширить. Гладкий переход применяет к

строкам и колонкам изображения одномерный гладкий метод расширения, который используется в инструменте измерения шероховатости для подавления артефактов на границе.

4.15 Вейвлет-преобразование

Вейвлет-преобразование - преобразование, похожее на преобразование Фурье (или гораздо больше на оконное преобразование Фурье) с совершенно иной оценочной функцией. Основное различие лежит в следующем: преобразование Фурье раскладывает сигнал на составляющие в виде синусов и косинусов, т.е. функций, локализованных в Фурье-пространстве; напротив, вейвлет-преобразование использует функции, локализованные как в реальном, так и в в Фурье-пространстве. В общем, вейвлет-преобразование может быть выражено следующим уравнением:

$$F(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \psi^*_{(a,b)}(x)\, \mathrm{d}x$$

где * - символ комплексной сопряженности и функция ψ - некоторая функция. Функция может быть выбрана произвольным образом, но она должна удовлетворять определённым правилам.

Как видно, вейвлет-преобразование на самом деле является бесконечным множеством различных преобразований в зависимости от оценочной функции, использованной для его расчёта. Это является основной причиной, почему термин «вейвлет-преобразование» используется в весьма различных ситуациях и для различных применений. Также существует множество типов классификации вариантов вейвлет-преобразования. Здесь мы покажем только деление, основанное на ортогональности вейвлетов. Можно использовать ортогональные вейвлеты для дискретного вейвлет-преобразования и неортогональные вейвлеты для непрерывного. Эти два вида преобразования обладают следующими свойствами:

1. Дискретное вейвлет-преобразование возвращает вектор данных той же длины, что и входной. Обычно, даже в этом векторе многие данные почти равны нулю. Это соответствует факту, что он раскладывается на набор вейвлетов (функций), которые ортогональны к их параллельному переносу и масштабированию. Следовательно, мы раскладываем подобный сигнал на то же самое или меньшее число коэффициентов вейвлет-спектра, что и количество точек данных сигнала. Подобный вейвлет-спектр весьма хорош для обработки и сжатия сигналов, например, поскольку мы не получаем здесь избыточной информации.
2. Непрерывное вейвлет-преобразование, напротив, возвращает массив на одно измерение больше входных данных. Для одномерных данных мы получаем изображение плоскости время-частота. Можно легко проследить изменение частот сигнала в течение его длительности и сравнивать этот спектр со спектрами других сигналов. Поскольку здесь используется неортогональный набор вейвлетов, данные высоко коррелированы и обладают большой избыточностью. Это помогает видеть результат в более близком человеческому восприятию виде.

Дополнительные подробности о вейвлет-преобразовании доступны на тысячах интернет-ресурсов о вейвлетах в сети, или, например, здесь [1].

В библиотеке обработки данных Gwyddion реализованы оба этих преобразования и использующие вейвлет-преобразование модули доступны в меню Обработка данных → Интегральные преобразования.

Дискретное вейвлет-преобразование

Дискретное вейвлет-преобразование (DWT) - реализация вейвлет-преобразования с использованием дискретного набора масштабов и переносов вейвлета, подчиняющихся некоторым определённым правилам. Другими словами, это преобразование раскладывает сигнал на взаимно ортогональный набор вейвлетов, что является основным отличием от непрерывного вейвлет-преобразования (CWT), или его реализации для дискретных временных рядов, иногда называемой непрерывным вейвлет-преобразованием дискретного времени (DT-CWT).

Вейвлет может быть сконструирован из функции масштаба, которая описывает свойства его масштабируемости. Ограничение состоит в том, что функция масштаба должна быть ортогональна к своим дискретным преобразованиям, что подразумевает некоторые математические ограничения на них, которые везде упоминаются, т.е. уравнение гомотетии

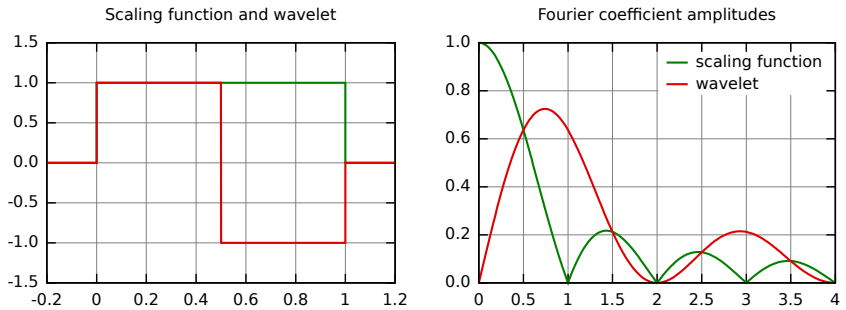
$$\phi(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k \phi(Sx-k)$$

где S - фактор масштаба (обычно выбирается как 2). Более того, площадь под функцией должна быть нормализована и функция масштабирования должна быть ортогональна к своим численным переносам, т.е.

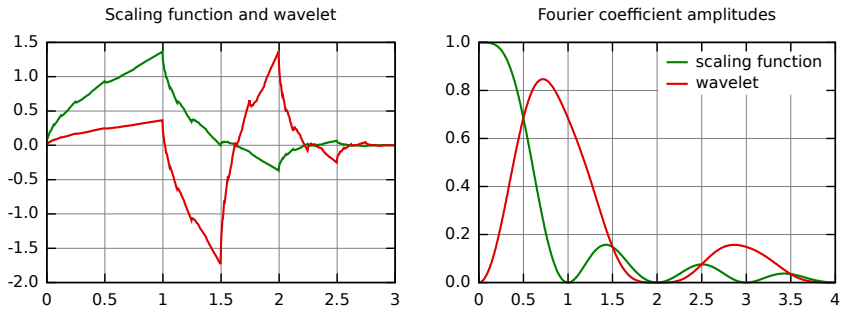
$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)\, \phi(x+l)\, \mathrm{d}x = \delta_{0,l}$$

После введения некоторых дополнительных условий (поскольку вышеупомянутые ограничения не приводят к единственному решению) мы можем получить результат всех этих уравнений, т.е. конечный набор коэффициентов a_k которые определяют функцию масштабирования, а также вейвлет. Вейвлет получается из масштабирующей функции как N где N - чётное целое. Набор вейвлетов затем формирует ортонормированный базис, который мы используем для разложения сигнала. Следует отметить, что обычно только несколько коэффициентов a_k будут ненулевыми, что упрощает расчёты.

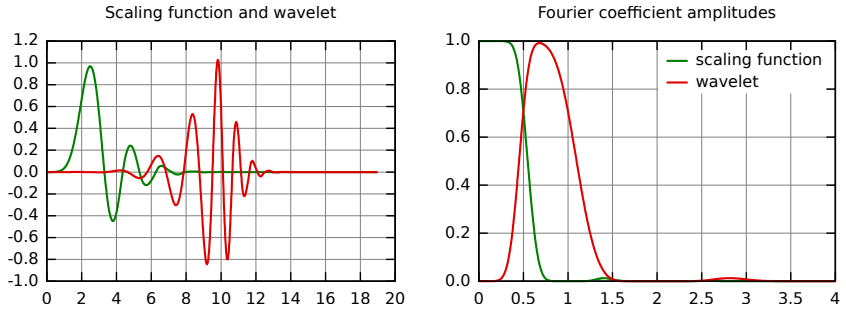
На следующем рисунке показаны некоторые масштабирующие функции и вейвлеты. Наиболее известным семейством ортонормированных вейвлетов является семейство Добеши. Её вейвлеты обычно обозначаются числом ненулевых коэффициентов a_k, таким образом, мы обычно говорим о вейвлетах Добеши 4, Добеши 6, и т.п. Грубо говоря, с увеличением числа коэффициентов вейвлета функции становятся более гладкими. Это явно видно при сравнении вейвлетов Добеши 4 и 20, представленных ниже. Другой из упомянутых вейвлетов - простейший вейвлет Хаара, который использует прямоугольный импульс как масштабирующую функцию.



Функция масштабирования Хаара и вейвлет (слева) и их частотные составляющие (справа).



Функция масштабирования Добеши 4 и вейвлет (слева) и их частотные составляющие (справа).



Функция масштабирования Добеши 20 и вейвлет (слева) и их частотные составляющие (справа).

Существует несколько видов реализации алгоритма дискретного вейвлет-преобразования. Самый старый и наиболее известный – алгоритм Малла (пирамидальный). В этом алгоритме два фильтра – сглаживающий и несглаживающий составляются из коэффициентов вейвлета и эти фильтры рекуррентно применяются для получения данных для всех доступных масштабов. Если используется полный набор данных $D = 2^N$ и длина сигнала равна L, сначала рассчитываются данные $D/2$ для масштаба $L/2^{N-1}$, затем данные $(D/2)/2$ для масштаба $L/2^{N-2}$, ... пока в конце не получится 2 элемента данных для масштаба $L/2$. Результатом работы этого алгоритма будет массив той же длины, что и входной, где данные обычно сортируются от наиболее крупных масштабов к наиболее мелким.

В Gwyddion для расчёта дискретного вейвлет-преобразования используется пирамидальный алгоритм. Дискретное вейвлет-преобразование в двумерном пространстве доступно в модуле DWT.

Дискретное вейвлет-преобразование может использоваться для простого и быстрого удаления шума с зашумлённого сигнала. Если мы возьмём только ограниченное число наиболее высоких коэффициентов спектра дискретного вейвлет-преобразования, и проведём обратное вейвлет-преобразование (с тем же базисом) мы можем получить сигнал более или менее очищенный от шума. Есть несколько способов как выбрать коэффициенты, которые нужно сохранить. В Gwyddion реализованы универсальный порог, адаптивный по масштабу порог [2] и адаптивный по масштабу и пространству порог [3]. Для определения порога в этих методах мы сперва определяем оценку дисперсии шума, заданную

$$\hat{\sigma} = \frac{\mathrm{Median}\,|Y_{ij}|}{0.6745}$$

где Y_{ij} соответствует всем коэффициентам наиболее высокого поддиапазона масштаба разложения (где, как предполагается, должна присутствовать большая часть шума). Или же дисперсия шума может быть получена независимым путём, например, как дисперсия сигнала АСМ, когда сканирование не идёт. Для наиболее высокого поддиапазона частот (универсальный порог) или для каждого поддиапазона (для адаптивного по масштабу порога) или для окружения каждого пикселя в поддиапазоне (для адаптивного по масштабу и пространству порога) дисперсия рассчитывается как

$$\hat{\sigma}_Y^2 = \frac{1}{n^2} \sum_{i,j=1}^{n} Y_{ij}^2$$

Значение порога считается в конечном виде как

$$T(\hat{\sigma}_X) = \hat{\sigma}^2 / \hat{\sigma}_X$$

где

$$\hat{\sigma}_X = \sqrt{\max(\hat{\sigma}_Y^2 - \hat{\sigma}^2, 0)}$$

Когда порог для заданного масштаба известен, мы можем удалить все коэффициенты меньше значения порога (жесткий порог) или мы можем уменьшит абсолютное значение этих коэффициентов на значение порога (мягкий порог).

Удаление шума DWT доступно в меню Обработка данных → Интегральные преобразования → Удаление шума DWT .

Непрерывное вейвлет-преобразование CWT

Непрерывное вейвлет-преобразование (CWT) - реализация вейвлет-преобразования с использованием произвольных масштабов и практически произвольных вейвлетов. Используемые вейвлеты не ортогональны и данные, полученные в ходе этого преобразования высоко коррелированы. Для дискретных временных последовательностей также можно использовать это преобразование, с ограничением что наименьшие переносы вейвлета должны быть равны дискретизации данных. Это иногда называется непрерывным вейвлет-преобразованием дискретного времени (DT-CWT) и это наиболее часто используемый метод расчёта CWT в реальных применениях.

В принципеЮ непрерывное вейвлет-преобразование работает используя напрямую определение вейвлет-преобразования, т.е. мы рассчитываем свёртку сигнала с масштабированным вейвлетом. Для каждого масштаба мы получаем этим способом набор той же длины N, что и входной сигнал. Используя M произвольно выбранных масштабов мы получаем поле $N \times M$, которое напрямую представляет плоскость время-частота. Алгоритм, используемый для этого расчёта может быть основан на прямой свёртке или на свёртке посредством умножения в Фурье-пространстве (это иногда называется быстрым вейвлет-преобразованием).

Выбор вейвлета для использования в разложении на время-частоту является наиболее важной вещью. Этим выбором мы можем влиять на разрешение результата по времени и по частоте.Нельзя изменить этим путём основные характеристики вейвлет-преобразования (низкие частоты имеют хорошее разрешение по частотам и плохое по времени; высокие имеют плохое разрешение по частотам и хорошее по времени), но можно несколько увеличить общее разрешение по частотам или по времени. Это напрямую пропорционально ширине используемого вейвлета в реальном и Фурье-пространстве. Если, например, использовать вейвлет Морле (реальная часть – затухающая функция косинуса), то можно ожидать высокого разрешения по частотам, поскольку такой вейвлет очень хорошо локализован по частоте. наоборот, используя вейвлет Производная Гауссиана (DOG) мы получим хорошую локализацию по времени, но плохую по частоте.

Непрерывное вейвлет-преобразование реализовано в модуле CWT, который доступен в меню Обработка данных → Интегральные преобразования → CWT.

Источники

[1] Adhemar Bultheel: Learning to swim in a sea of wavelets. Bull. Belg. Math. Soc. Simon Stevin 2 (1995), 1-45, doi:10.36045/bbms/1103408773

[2] S. G. Chang, B. Yu, M. Vetterli: Adaptive wavelet thresholding for image denoising and compression. IEEE Trans. Image Processing 9 (2000) 1532–1536, doi:10.1109/83.862633

[3] S. G. Chang, B. Yu, M. Vetterli: Spatially adaptive wavelet thresholding with context modeling for image denoising. IEEE Trans. Image Processing 9 (2000) 1522–1531, doi:10.1109/83.862630

4.16 Фрактальный анализ

В практике встречаются объекты, которые демонстрируют случайные свойства. Часто предполагается, что в определённом диапазоне масштабов эти объекты демонстрируют свойства аффинного самоподобия. Аффинное самоподобие является обобщением самоподобия, которое является основным свойством большинства детерминированных фракталов. Часть аффинно-самоподобного объекта подобна целому объекту после анизотропного масштабирования. Многие случайно шероховатые поверхности считаются принадлежащими к классу случайных объектов, которые проявляют свойства аффинного самоподобия и они рассматриваются как аффинно-самоподобные статистические фракталы. Разумеется, эти поверхности можно исследовать используя атомно-силовую микроскопию (АСМ). Результаты фрактального анализа аффинно-самоподобных случайных поверхностей с использованием АСМ нередко используются для классификации подобных поверхностей, полученных в результате различных технологических процессов [1,2,3,4].

В Gwyddion доступны различные виды фрактального анализа в меню Обработка данных → Статистика → Фрактальная размерность.

Метод подсчёта кубов [1,2] выводится напрямую из определения фрактальной размерности, основанного на подсчёте блоков. В основе алгоритма лежат следующие шаги: кубическая решетка с постоянной решетки l накладывается на расширенную по z поверхность. Изначально l задаётся равной $X/2$ (где X это длина края поверхности), в результате получается решетка из $2\times2\times2=8$ кубов. Тогда $N(l)$ это число всех кубов, содержащих хотя бы один пиксель изображения. Постоянная решетки l на каждом шаге уменьшается в два раза и процесс повторяется до тех пор, пока l не станет равной расстоянию между двумя соседними пикселями. Наклон графика $\log N(l)$ от $\log 1/l$ напрямую даёт фрактальную размерность D_f.

Метод триангуляции [1] весьма похож на алгоритм подсчёта кубов и тоже напрямую основан на определении фрактальной размерности, основанном на подсчёте блоков. Метод работает следующим образом: сетка с размером ячейки в одну единицу измерения l помещается на поверхность. Это определяет положения вершин набора треугольников. Когда, например, $l=X/4$, поверхность покрыта 32 треугольниками различной площади наклонёнными под разными углами по отношению к плоскости xy. Площади всех треугольников рассчитываются и суммируются чтобы получить приближенную площадь поверхности $S(l)$, соответствующую l. Размер сетки затем уменьшается последовательно в два раза на каждом шаге, как и раньше, процесс продолжается до тех пор, пока не станет равным расстоянию между двумя соседними точками. Наклон графика $S(l)$ от $\log 1/l$ при этом соответствует $D_\mathrm{f}-2$.

Вариационный метод (метод разделения) [3,4] основан на зависимости от масштаба дробного броуновского движения. На практике, в вариационном методе делят полную поверхность на равносторонние квадратные блоки, и вариация (степень среднеквадратичного значения высоты) рассчитывается для заданного размера блоков. Фрактальная размерность рассчитывается из наклона β аппроксимированной методом наименьших квадратов линии на графике в двойном логарифмическом масштабе вариации как $D_\mathrm{f}=3-\beta/2$.

Метод спектра мощности [3,4,5] основан на зависимости спектра мощности дробного броуновского движения. В методе спектра мощности каждый линейный профиль высоты, из которых состоит изображение, преобразуется с помощью преобразования Фурье, рассчитывается спектр мощности и затем все эти спектры усредняются. Фрактальная размерность определяется из наклона β аппроксимирующей линии, проведённой по методу наименьших квадратов на построенном в двойном логарифмическом масштабе графике спектра мощности, как $D_\mathrm{f}=7/2+\beta/2$.

Оси на графиках фрактальной размерности уже приведены к логарифмическому масштабу, следовательно линейные зависимости, упомянутые выше, там соответствуют прямым. Единицы измерения осей следует считать произвольными.

Следует отметить, что результаты различных методов различаются. Это явление вызвано систематическими ошибками различных методов фрактального анализа.

Диалоговое окно расчёта фрактальной размерности.

Более того, на результат фрактального анализа может сильно влиять свёртка с зондом. Мы рекомендуем поэтому проверять карту достоверности до начала фрактального анализа. В случае, если поверхность сильно искажена изображением зонда, результаты фрактального анализа могут быть весьма недостоверными.

Следует отметить, что алгоритмы, используемые во фрактальном анализе также используются в модуле фрактальной коррекции и опции инструмента удаления пятен «фрактальная коррекция».

Источники

[1] C. Douketis, Z. Wang, T. L. Haslett, M. Moskovits: Fractal character of cold-deposited silver films determined by low-temperature scanning tunneling microscopy. Physical Review B 51 (1995) 11022, doi:10.1103/PhysRevB.51.11022

[2] W. Zahn, A. Zösch: The dependence of fractal dimension on measuring conditions of scanning probe microscopy. Fresenius J Analen Chem 365 (1999) 168-172, doi:10.1007/s002160051466

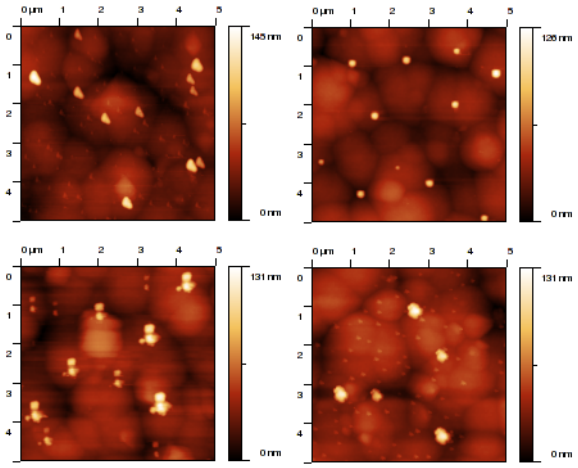
[3] A. Van Put, A. Vertes, D. Wegrzynek, B. Treiger, R. Van Grieken: Quantitative characterization of individual particle surfaces by fractal analysis of scanning electron microscope images. Fresenius J Analen Chem 350 (1994) 440-447, doi:10.1007/BF00321787

[4] A. Mannelquist, N. Almquist, S. Fredriksson: Influence of tip geometry on fractal analysis of atomic force microscopy images. Appl. Phys. A 66 (1998) 891-895, doi:10.1007/s003390051262

[5] W. Zahn, A. Zösch: Characterization of thin film surfaces by fractal geometry. Fresenius J Anal Chem 358 (1997) 119-121, doi:10.1007/s002160050360

4.17 Артефакты взаимодействия с зондом

Артефакты взаимодействия с зондом являются одним из главных источников ошибок в СЗМ. Поскольку зонд никогда не является идеальным (подобно дельта-функции), мы нередко наблюдаем искажения изображения, связанные с этим явлением. Можно даже увидеть изображение зонда на скане поверхности, если на поверхности присутствуют острые выступы.



Изображения поверхности ZnSe, измеренной четырьмя разными зондами (более или менее испорченными).

Мы, к счастью, можем смоделировать и/или исправить влияние зонда используя алгоритмы расширения и/или эрозии, соответственно. Эти алгоритмы были опубликованы Вильярубия (see [1]).

Получение геометрии зонда

Для исследования влияния зонда на данные мы должны прежде знать его геометрию. В общем случае, геометрия зонда может быть получена несколькими способами:

1. используя спецификации поставщика (геометрию зонда, радиус острия и угол).
2. используя сканирующую электронную микроскопию или другую независимую методику измерения свойств зонда.
3. используя известный образец для характеризации зондов (с острыми кромками)
4. используя алгоритм слепой оценки зонда с использованием образцов для тестирования зондов или других подходящих

Моделирование зонда

Обработка данных → Зонд и индентация → Модель зонда

Моделирование зонда реализует первый подход. Используя моделирование зонда можно промоделировать большую часть зондов с простой геометрией. Этот тип задания геометрии зонда может быть очень эффективным, например, если нам нужно просто проверить карту достоверности или провести моделирование свёртки с зондом.

Данная функция предлагает несколько модельных функций, таких, как пирамиды, конусы и параболоиды. Каждая описывается подмножеством следующих параметров:

Число сторон Количество сторон пирамиды применимо к пирамидальным зондам (которые не имеют некоторого наперёд заданного числа сторон по определению).

Угол зонда Угол стороны пирамиды, измеренный относительно вертикальной плоскости. Малые углы означают невысокие зонды, большие углы острые зонды.

Поворот зонда Поворот относительно базовой ориентации, измеряемый против часовой. Применимо к тем зондам, которые не симметричны относительно вращения.

Радиус острия зонда Средний радиус кривизны острия зонда (применяется для всех форм зонда кроме дельта-функции). Если зонд не анизотропен, то это просто радиус кривизны во всех направлениях.

Анизотропия зонда Соотношение, определяющее насколько зонд сжат по одному из двух ортогональных направлений по сравнению с другим. Только модель эллиптической параболы имеет параметр анизотропии.

Размеры изображения зонда определяются автоматически используя исходные данные для того, чтобы перекрыть диапазон значений z данных.

Слепая оценка формы зонда

Обработка данных → Зонд и индентация → Слепая оценка

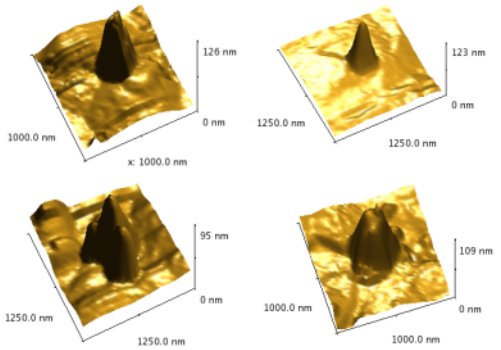
Чтобы получить более детальную (и более реалистичную) структуру зонда можно использовать алгоритм слепой оценки формы зонда. Слепая оценка зонда основана на применении хорошо известного факта. что на некоторых данных о поверхности мы можем непосредственно увидеть изображения отдельных деталей зонда. Алгоритм перебирает все точки данных поверхности и в каждой точке пытается уточнить каждую точку зонда в соответствии с наибольшим наклоном в направлении между заданной точкой зонда и его острием.

В Gwyddion можно использовать две модификации вышеприведённого алгоритма: частичная оценка зонда, которая использует только ограниченное число наиболее высоких точек изображения и полная оценка, которая использует изображение целиком (и, вследствие этого, гораздо медленнее). В модуле оценки зонда Gwyddion можно также использовать частичную оценку как начальную точку для полной оценки. Это должно улучшить скорость работы полной оценки.

Типичной процедурой будет

1. Использовать Сброс зонда чтобы начать заново, например, после изменения параметров.
2. Запустить частичную оценку используя Выполнить частично.
3. Запустить полную оценку используя Выполнить полностью.

Возможно - и нередко полезно - запустить полную оценку с несколькими изображениями топографии последовательно. Это можно сделать выбирая последовательно изображения как Связанные данные и запуская оценку.



изображения зондов СЗМ, полученные из данных предыдущего рисунка используя алгоритм слепой оценки.

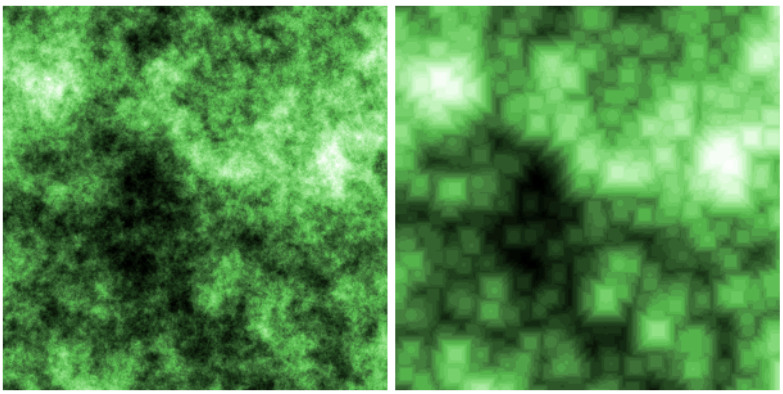
Форма зонда может меняться в процессе сканирования. Следовательно, иногда может оказаться полезным посмотреть как слепая оценка меняется в зависимости от линии сканирования. Естественно, оценка на основе одной линии сканирования будет невозможна. Следовательно, изображение разбивается на горизонтальные полосы и зонд оценивается для каждой из этих полос.

Обработка отдельных полос включается с помощью опции Разбить на полосы, которая также управляет количеством таких полос. Можно выбрать, какой зонд будет отображаться используя опцию Предпросмотр полосы. График радиуса закругления зонда показывается под изображением предпросмотра и может быть создан отдельно как результат работы модуля если включена опция Строить график размеров. Функция также может создавать полную последовательность изображений слепой оценки формы зонда, это включается с помощью опции Создать изображения зонда.

Свёртка с зондом и восстановление поверхности

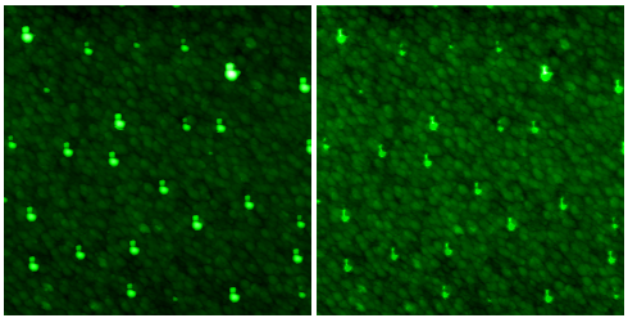
Когда нам известна геометрия зонда, мы можем использовать алгоритм свёртки зонда с поверхностью (расширение поверхности) для моделирования процесса получения данных. Для этого используется модуль расширения (Обработка данных → Зонд и индентация → Расширение). Это, например, может быть полезно при работе с данными, полученными в результате численного моделирования (см., например, [2]).

Следует заметить, что этот алгоритм (также, как и следующие два) требует совместимых данных о скане и о зонде, т.е. физические величины размера точек скана и точек изображения зонда должны быть одинаковыми. Это соотношение автоматически гарантируется для моделей зонда, полученных методом слепой оценки на том же наборе данных (или на данных с похожей размерностью). Если изображение получено другим путём, возможно придётся его пересчитать в нужное разрешение.



Модель фрактальной поверхности до (слева) и после (справа) свёртки с зондом.

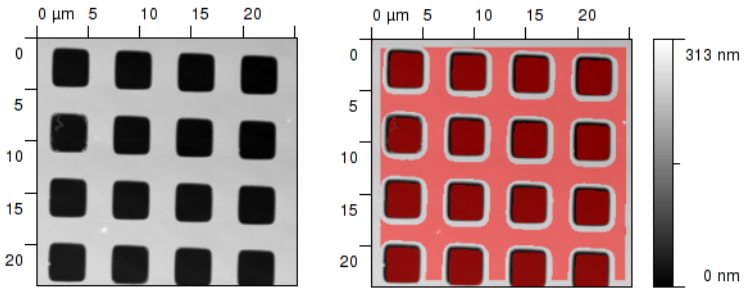
Обратной операцией к свёртке является восстановление поверхности (эрозия), которая позволяет частично исправить влияние геометрии зонда на данные изображения. Для этого используйте функцию восстановления поверхности (Обработка данных → Зонд и индентация → Восстановление поверхности). Конечно, те данные, которые соответствуют точкам, где зонд не касался поверхности (т.е. поры) не могут быть восстановлены, так как об этих точках нет достаточной информации.



Исходное и восстановленное изображение ZnSe полученное испорченным зондом СЗМ.

Карта достоверности

Как видно, наиболее проблемными участками изображения СЗМ являются точки, где зонд касался поверхности не в одной точке, а в нескольких. В этих точках наблюдается потеря информации. Алгоритм построения карты достоверности может отметить те точки, где зонд вероятно касался поверхности только в одной точке.



Карта достоверности. полученная со стандартной решетки. Следует отметить, что параметры модели зонда были взяты с технического описания для демонстрационных целей . Слева образец, справа – он же с картой достоверности.

Следовательно, для выделения на изображении СЗМ данных, повреждённых в результате взаимодействия с зондом необратимым образом может использоваться аогоритм карты достоверности. Для анализа данных СЗМ на изображениях с большими уклонами всегда важно проверять наличие подобных точек. В Gwyddion можно использовать функцию карты достоверности для создания таких карт (Обработка данных → Зонд и индентация → Карта достоверности).

Источники

[1] J. S. Villarrubia: Algorithms for Scanned Probe Microscope Image Simulation, Surface Reconstruction, and Tip Estimation. J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. 102 (1997) 425, doi:10.6028/jres.102.030

[2] P. Klapetek, I. Ohlídal: Theoretical analysis of the atomic force microscopy characterization of columnar thin films. Ultramicroscopy 94 (2003) 19–29, doi:10.1016/S0304-3991(02)00159-6

4.18 Силы и индентирование

Анализ отпечатка

Обработка данных → Режимы СЗМ → Силы и индентирование → Анализ отпечатка...

Одуль определяет различные характеристические области отечатка и рассчитывает соответствующие площади поверхности и проекции (A_p и A_d), а также объёмы.

Отпечаток Определяется как область вокруг локального минимума с одинаковым вектором нормали (с точностью до симметричного отображения). Это соответствует обычному определению области контакта.

Внутреннее выдавливание Часть отпечатка лежащая выше базовой плоскости.

Внешнее выдавливание Часть отпечатка, лежащего выше базовой плоскости, но вектор нормали к которой отличается от отпечатка.

Особые точки Включают максимум, минимум и точки вдоль направления наискорейшего спуска.

Ожидаемые площади поверхности и проекции Приводятся значения, полученные расчётом теоретической функции площади для выбранного типа индентора на глубине отпечатка.

Объём выше-ниже Объем выше-ниже это разность между объёмом над базовой плоскостью и объёмом под ней.

Следует отметить, что в этом модуле данные выравниваются аппроксимацией плоскостей вдоль границ изабражения. Это может приводить к несоответствиям между значениям, возвращаемым этой моделью и аналогичными, получаемыми с помощью инструмента Статистических величин. Данные необходимо выравнивать вручную чтобы уменьшить этот эффект.

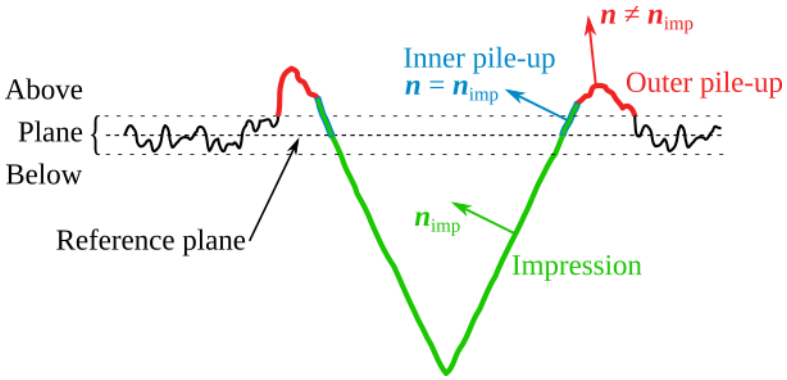


Схема различных областей на отпечатке: над плоскостью, под ней, плоскость, отпечаток, внутреннее выдавливание и внешнее выдавливание.

4.19 Свёртка и деконволюция

Несколько функций Gwyddion делают некоторые разновидности операций свёртки и деконволюции. Тонкий вопрос, который приводит к непониманию, это разница между непрерывными и дискретными операциями. Когда изображения f и g являются распределениями физических величин, т.е. дискретными замерами некоторого

поля в пространстве, их свёртка h

$$h(x) = \int_A f(x-u)\, g(u)\, \mathrm{d}u$$

также будет физической величной. Её физическая размерность (единицы измерения) будет

$$\dim(h) = \dim(f)\, \dim(g)\, \dim(A)$$

. Для изображений $\dim(A)$ имеет размерность площади изображения, т.е. обычно квадратных метров.

Когда интеграл реализован с помощью дискретной суммы Римана

$$h_n \approx \Delta A \sum_k f_{n-k} g_k$$

площадь представляет собой площадь одного пикселя ΔA. Это то, как все операции свёртки. деконволюции и передаточной функции работают в Gwyddion по умолчанию, т.е. когда опция Нормализовать как интеграл включена.

В цифровой обработке изображений физические единицы измерения иногда игнорируются и свёртка понимается как простая дискретная свёртка изображений

$$h_n = \sum_k f_{n-k} g_k$$

Такое поведение можно включить выключив опцию Нормализовать как интеграл для данной функции. Необходимо принимать во внимание, что результат операции в данном случае перестанет быть физической величиной, дискретизованной в пространстве (он зависит от размера пикселя) и единицы измерения станут другими. Единственной функцией, которая работает таким образом по умолчанию является Фильтр свёртки, где один из операндов это небольшая матрица безразмерных чисел.

Свёртка изображений

Обработка данных → Множественные данные → Свёртка

Свёртку двух изображений можно произвести используя модуль Свёртка (см. также Фильтр свёртки для свёртки с небольшим ядром, вводимым численно). Модуль имеет всего несколько параметров:

Ядро свёртки Меньшее изображение, с которым будет производиться свёртка большего изображения, например, изображение передаточной функции зонда. Размерности одного пикселя в обоих изображениях должны соответствовать друг другу.

Тип внешней части Какие значения должны присваиваться пикселям снаружи изображения (как в Расширить).

Размер результата Размер результирующего изображения по отношению к тому, какие из пикселей входили в расчёт. Обрезать до внутренней части обрезает изображение таким образом, чтобы в него входили только пиксели достаточно далеко от границы, чтобы граница не влияла на результат. Сохранить размер создаёт изображение такого же размера .как исходное. И, наконец, Расширить до размера после свёртки означает. что результат будет расширен по каждой стороне на половину размера ядра.

Деконволюция изображения

Обработка данных → Множественные данные → Деконволюция

A simple regularized deconvolution of two images can be performed using Deconvolve. L-curve method can be used to search for the optimum regularization parameter, however its applicability highly depends on the data. The module has the following options:

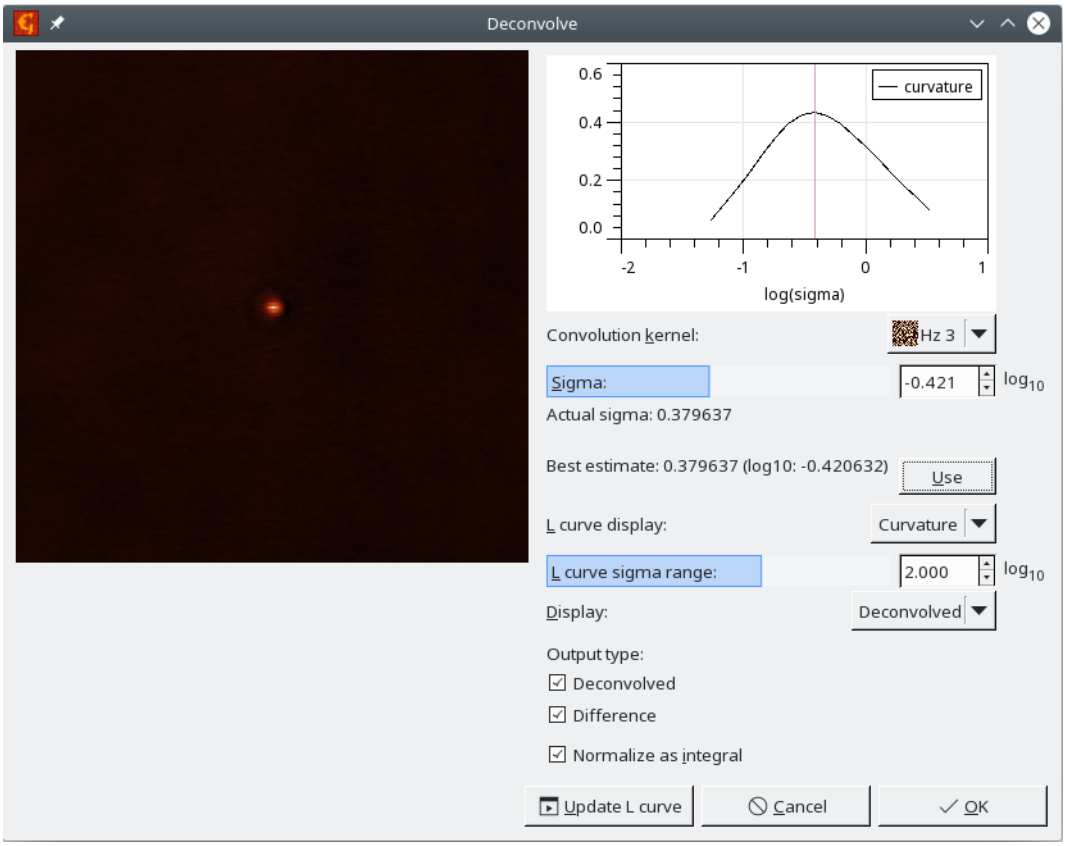
Ядро свёртки Ядро, деконволюция с которым будет проводиться для текущего изображения.

Параметр регуляризации Параметр регуляризации

Отображение L-кривой Данные будут показаны на опциональном графике L-кривой, когда он будет рассчитан. L-кривая состоит из двух источников данных: разности между результатом свёртки с ядром и исходных данных и нормой результата. Эти два набора данных строятся на графике в двойном логарифмическом масштабе, в результате получается L-кривая, но их зависимость от параметров регуляризации также может быть построена отдельно. Кривизна получаемой кривой зависимости от параметра регуляризации даёт обычный критерий для поиска наилучших параметров регуляризации путём поиска максимума кривой.

Диапазон сигма L-кривой Диапазон параметров регуляризации, который будет использоваться при расчёте L-кривой. Он, так же как и параметр регуляризации, логарифмический, поэтому может простираться в достаточно широких пределах, не обязательно подходящих к отдельному частному набору данных.

Тип вывода. Результат деконволюции даёт изображение деконволюции; Разница показывает разницу между изображением после свёртки обратно и входным изображением.



Снимок экрана диалогового окна деконволюции после того, как рассчитаны данные L-кривой.

Оценка передаточной функции

Передаточная функция зонда (или функция рассеяния точки, импульсный отклик, point spread function, PSF, ПФ) может быть оценена из измеренных данных, даже зашумлённых, если доступен соответствующий идеально чёткий сигнал. В Gwyddion на данный момент реализовано несколько относительно простых методов.

Обработка данных → Статистика → Оценка передаточной функции. Общий вид интерфейса пользователя для данного модуля и типичная его работа с смоделированными зашумленными данными показан на следующих рисунках.

Чёткий сигнал выбирается как Идеальный отклик. Он должен иметь те же размеры, что и изображение. В отличие от общего модуля деконволюции, этот модуль оптимизирован в плане статистических свойств передаточной функции. В настоящее время доступны три метода деконволюции:

Регуляризованный фильтр Простой фильтр в пространстве частот с регуляризующим параметром. Он выдаёт изображение передаточной функции такого же размера, как и исходные изображения. Параметр Масштаб ПФ можно использовать чтобы показать увеличенную центральную часть изображения.

Наименьших квадратов Передаточная функция находится путём решения задачи наименьших квадратов, соответствующей деконволюции. Размер передаточной функции может быть выбран произвольно. Обычно он гораздо меньше, чем исходные изображения.

Параметр Размер управляет размером изображения передаточной функции. Если Граница ненулевая, изображение передаточной функции увеличивается на это значение перед решением методом наименьших квадратов и затем граница обрезается. Небольшое значение порядка 2 или 3 нередко улучшает результат поскольку ошибки имеют тенденцию накапливаться в граничных пикселях. Оба размера могут быть оценены автоматически используя Оценить размер.

Фильтр Винера Псевдо-фильтр Винера, предполагающий что спектральную плотность выходного изображения можно оценить по спектральной плотности входного. Это снова фильтр, работающий в пространстве частот и дающий передаточную функцию такого же размера, как исходные изображения. Опцию Масштаб ПФ можно использовать для того, чтобы показать увеличенную центральную часть изображения.

Два важных параметра влияют на результат. безразмерный параметр регуляризации σ, который используется во всех методах, но не сравним напрямую между ними. Он может быть выбран вручную. Поскольку подходящие значения могут отличаться на несколько порядков величины, он представлен как логарифм по основанию 10. Однако, модуль может найти подходящее значение автоматически если нажато Аппрокс. параметр регуляризации

Тип окна определяет оконную функцию, применяемую к обоим изображениям перед деконволюцией. Если исходные данные не являются периодическими, применение оконной функции необходимо для устранения похожих на кресты артефактов в передаточной функции. Применяемое по умолчанию окно Велча обычно является хорошим выбором.

Несколько характеристик передаточной функции сразу же показаны в нижней части диалогового окна как Результат:

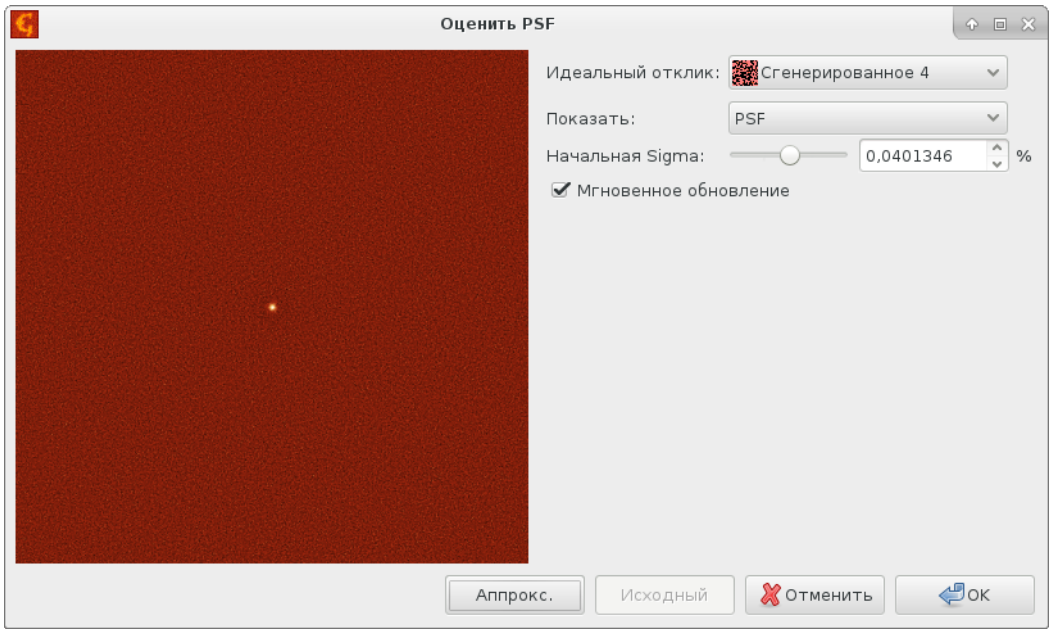
ширина ПФ Ширина, которая считается как квадратный корень от дисперсии если передаточная функция считается распределением. В расчёт включается только центральный пик (что важно особенно для регуляризованного фильтра и фильтра Винера). Обычно оптимальное восстановление имеет также малую ширину.

высота ПФ Максимальное значение передаточной функции. Когда оно начинает заметно уменьшаться, параметр регуляризации возможно становится слишком большим.

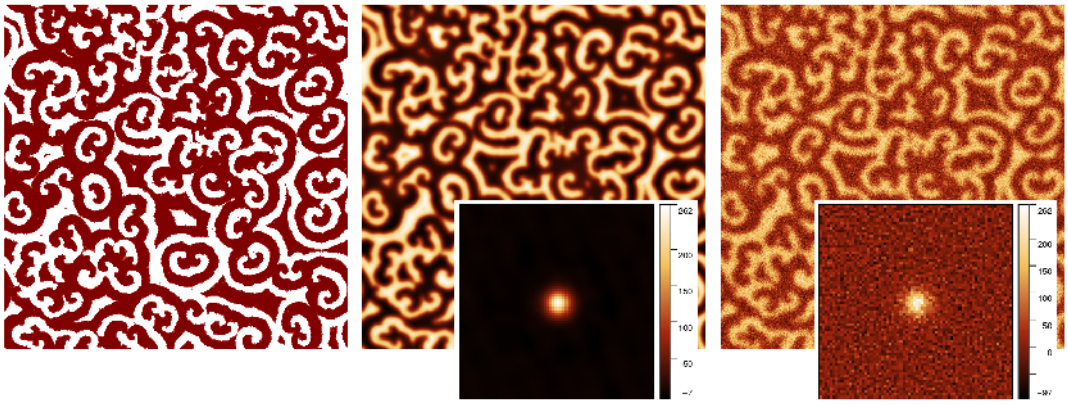
норма ПФ Среднеквадратичное значение передаточной функции.

Норма разницы Среднеквадратичное значение разности между исходным изображением и идеально чётким изображением после свёртки его с восстановленной передаточной функцией.

Вкладка Параметры вывода позволяет выбрать какие изображения будет выдавать функция: передаточную функцию (Передаточная функция), её свёртку с идеально чётким изображением (Результат свёртки) и/или разницу между входным изображением и изображением после свёртки (Разница). Для методов, которые получают изображения передаточной функции полного размера Только увеличенная часть ограничивает размер выходных изображений увеличенной их частью, показанной в диалоговом окне.



Снимок экрана модуля оценки передаточной функции.



Тестовые результаты модуля оценки передаточной функции.

Альтернативный способ оценки точечной функции зонда основывается на аппроксимации явно заданной формы функции, например, гауссовой. Свободные параметры функции ищутся таким образом чтобы минимизировать сумму квадратов расстояний между измеренными данными и результатом свёртки идеальных данных с точечной функцией отклика. Поскольку минимизация может проводиться полностью в пространстве частот и не требует повторений операции свёртки, то метод является простым и быстрым, хотя и несколько грубым. Он доступен в меню Обработка данных → Статистика → Аппроксимация передаточной функции с реализованными на данный момент тремя модельными функциями: полностью симметричной гауссовой, анизотропной гауссовой, которая может иметь различную ширину в горизонтальном и вертикальном направлениях и передаточной функцией, являющейся экспоненциальной в пространстве частот.

4.20 Множественные данные

Арифметика

Обработка данных → Множественные данные → Арифметические операции

Модуль арифметики над данными позволяет проводить произвольные операции над точками отдельного поля данных или соответствующими точками нескольких полей данных (на текущий момент до восьми). И, хотя это не является его главным предназначением, он может использоваться как калькулятор с непосредственным расчётом выражений если ввести простое арифметическое выражение. Синтаксис выражений описан в разделе Выражения.

Выражение может содержать следующие переменные, соответствующие значениям отдельных входных изображений:

Переменная	Описание
d1, . . . , d8	Значение данных в точке. Значение записывается в основных физических единицах, например, для высоты в 233 нм, значение d1 равно 2.33e-7.
m1, . . . , m8	Значение маски в точке. Значение маски равно либо 0 (для немаскированных точек) либо 1 (для точек под маской). Переменные маски могут использоваться и если маска не задана, значение равно 0 во всех точках в этом случае.
bx1, . . . , bx8	Производная по горизонтали в точке. Снова значение в физических единицах. Производная считается как стандартная симметричная производная, кроме точек на границе, где берётся производная только с одной стороны.
by1, . . . , by8	Производная по вертикали в точке, определяется так же, как и производная по горизонтали.
x	Горизонтальная координата точки (в физических единицах). Одинакова во всех полях из-за требования совместимости (см. ниже).
y	Вертикальная координата точки (в физических единицах). Одинакова во всех полях из-за требования совместимости (см. ниже).

В дополнение определяется константа π, которую можно набирать либо как π, либо как pi.

Все изображения, которые реально используются в выражении должны быть совместимы. Это означает, что их размеры (как физические, так и в пикселях) должны быть идентичны. Другие поля данных (те, что не входят в выражения) ни на что не влияют. Результат всегда помещается в созданное заново изображение в текущем открытом файле (который может отличаться от файлов, содержащих все операнды).

Поскольку модуль расчёта не может автоматически вывести правильные физические единицы измерения результата, единицы должны быть явно указаны. Это можно сделать двумя путями: или выбрав поле данных с теми же единицами значений, что должны быть у результата, или выбрав опцию Задать единицы и введя единицы вручную.

Следующая таблица содержит несколько простых примеров выражений:

Выражение	Значение
-d1	Инвертирует значение. Результат очень похож на Инвертировать значение, за исключением того, что последнее инвертирует значения относительно среднего в то время, как здесь мы просто меняем знак у значений,
(d1 - d2)^2	Квадрат разницы между двумя полями данных.
d1 + m1*1e-8	Модификация значений под маской. Конкретно в этом случае значение 10^{-8} добавилось ко всем точкам под маской.
d1*m3 + d2*(1-m3)	Комбинация двух полей данных. Точки берутся либо из поля 1, либо из 2, в соответствии с маской, заданной на поле 3.

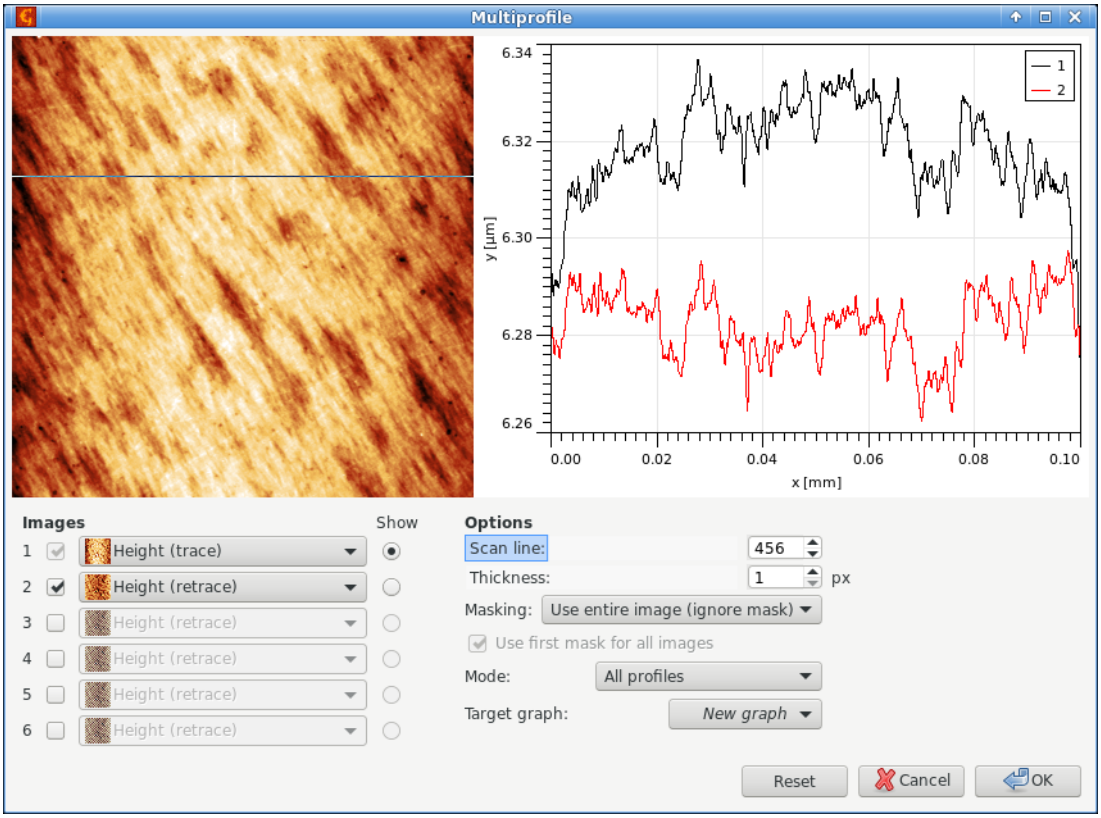
В режиме калькулятора выражение вычисляется сразу по мере его ввода и результат показывается под полем ввода выражения. Не требуется совершать специальных действий чтобы переключаться между выражениями над изображениями и калькулятором: выражения, содержащие только численные величины рассчитываются сразу, выражения, содержащие изображения используются чтобы рассчитать новое изображение. Изображение предпросмотра, показывающее результат операции с изображениями, не обновляется сразу следом за набором выражения; его можно обновить или нажатием на кнопку Обновить или нажатием Enter в поле ввода выражения.

Профили из нескольких изображений

Обработка данных → Множественные данные → Множественный профиль

Нередко может быть полезно сравнить соответствующие линии скана на разных изображениях, в частности на прямом и обратном проходе. Это можно сделать используя опцию Множественный профиль и выбирая два

изображения как 1 и 2 в списке Изображения. Выбранные линии скана будут показаны на изображении. Эту линию можно перемещать по изображению с помощью мыши или номер линиии скана можно ввести численно используя опцию Линия скана.



Основной тип использования модуля множественных профилей, где изображения прямого и обратного прохода сканирования выбраны в качестве 1 и 2 и соответствующая пара профилей показывается на графике.

Профили можно читать одновременно с нескольких изображений вплоть до шести. Можно включать и выключать отдельные изображения используя чекбоксы рядом с номером изображения. Любое из включенных изображений может показываться в маленьком окне предпросмотра, что управляется выбором их используя опцию Показать.

Поскольку график показывает взаимно соответствующие профили, все изображения должны иметь одинаковые размеры в пикселях и реальные, и должны представлять одну и ту же физическую величину. Изображение 1 рассматривается как особое в этом отношении. Оно не может быть не выбрано и оно задаёт разрешение и другие свойства. Другими словами, все остальные изображения должны быть совместимы с изображением 1.

Опции в нижней правой части окна включают стандартное управление шириной профиля (усреднением поперёк линии профиля), которая работает так же, как для обычного инструмента получения профиля, опции работы с маской и график для извлечения профилей. Маски могут быть как взяты из соответствующих изображений, так и маска первого изображения может использоваться для всех, в том случае, если опция Использовать первую маску для всех изображений включена.

Вместо того, чтобы извлекать отдельные профили, модуль может также рассчитывать простую статистику и строить сводные кривые - среднюю кривую с верхними и нижними границами. Это управляется опцией Режим.

Встроить фрагмент

Обработка данных → Множественные данные → Встроить

Встраивание вставляет фрагмент, изображение с более высоким разрешением, внутрь более крупного изображения. Изображение, на котором была запущена функция формирует большое, базовое изображение.

Положение фрагмента может быть задано вручную на большом изображении с помощью мыши. Кнопка Уточнить может быть затем использована для получения точных координат в окрестности текущей позиции, которые

дают максимум корреляции между фрагментом и большим изображением. Или наиболее подходящее положение может быть найдено на всём изображении с помощью кнопки Найти.

Следует отметить, что корреляционный поиск не чувствителен к масштабу значений и смещений, следовательно, автоматический поиск соответствия основан исключительно на свойствах данных, абсолютные значения высоты не играют значения.

Разрешение результата контролирует размер и разрешение результирующего изображения:

Увеличить разрешение большого изображения Разрешение результата определяется разрешением встраиваемого фрагмента. Следовательно, масштаб большого изображения увеличивается.

Снизить разрешение фрагмента Разрешение результата определяется разрешением большого изображения. Масштаб фрагмента уменьшается.

Выравнивание фрагмента выбирает преобразование значений z фрагмента:

Нет Подстройка значений z не производится.

Среднее значение Все значения изображения фрагмента сдвигаются на постоянную величину так, чтобы его среднее значение соответствовало среднему значению соответствующей области большого изображения.

Объединение

Обработка данных → Множественные данные → Объединить

Изображения, которые формируют части большего изображения, могут быть объединены вместе с помощью команды "Объединить." Изображение, на котором была запущена эта функция формирует базовое изображение, изображение, выбранное с помощью Объединить с, представляет второй операнд. Сторона базового изображения к которой будет присоединено второе управляется с помощью выпадающего меню Поместить второй операнд.

Если изображения идеально соответствуют друг другу, они могут просто совмещены сторонами без подстройки. Этот вариант выбирается опцией Нет в управляющем выравниванием элементе Выровнять второй операнд.

Однако, обычно необходимы подстройки. Если изображения имеют одинаковый размер и выровнены в направлении, перпендикулярном к направлению слияния, единственной степенью свободы будет возможное перекрытие. В данном случае может использоваться метод выравнивания объединение. В отличие от поиска корреляции, описанного ниже, сопоставляются абсолютные значения данных. Это делает данную опцию подходящей даже для слабо меняющихся изображений если их абсолютные значения высоты измерены точно.

Опция Корреляция выбирает автоматическое выравнивание с помощью основанного на корреляции поиска наилучшего соответствия. Поиск производится как вдоль направления, параллельного присоединяемой стороне, так и в перпендикулярном ему. Если присутствует параллельный сдвиг, результат расширяется таким образом, чтобы в него полностью поместились оба изображения (отсутствующие значения заполняются значением фона).

Опция Режим границы полезна только в последнем случае неточно выровненных изображений. Она управляет тем, что будет с пересекающейся частью обоих изображений:

Первый операнд Значения в пересекающихся областях берутся из первого, базового изображения.

Второй операнд Значения в пересекающихся областях берутся из второго изображения.

Сгладить Гладкий переход между первым и вторым изображением производится на пересекающейся области используя взвешенное среднее с подходящей функцией веса.

Сшивание

Обработка данных → Множественные данные → Сшивание

Сшивание является альтернативой модулю объединения изображений, описанному выше. Оно в основном полезно если точно известны относительные положения частей изображения поскольку позиции вводятся численною Они инициализируются с использованием смещений изображения, таким образом, если они правильны, сшитое изображение формируется автоматически. Кнопки Восстановить для каждой части возвращают вручную измененные смещения к первоначальным.

Взаимно кадрировать

Обработка данных → Множественные данные → Взаимное кадрирование

С помощью этого модуля можно кадрировать два слегка сдвинутых друг относительно друга изображения одной и той же области (например, до и после какого-то воздействия), или, другими словами, обрезать непересекающиеся части возле границы изображений.

Общая область определяется корреляцией большего изображения с центральной частью меньшего. Разрешения обоих изображений (количество точек на единицу длины) должны быть одинаковы.

На текущий момент единственным параметром сейчас является Второй операнд - будет посчитана корреляция между ним и текущим активным изображением и оба изображения будут обрезаны чтобы удалить непересекающиеся области возле границы.

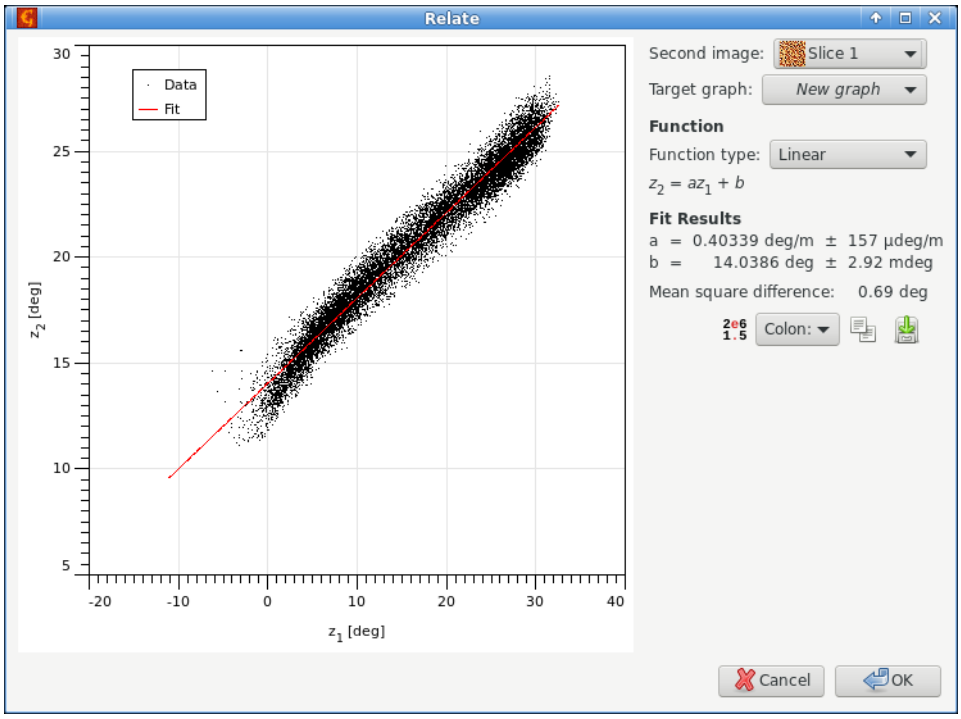
Взаимосвязь

Обработка данных → Множественные данные → Взаимосвязь

Когда данные двух изображений взаимосвязаны простым образом, например, они отличаются постоянным фактором калибровки, эта функция помогает найти такую взаимосвязь.

График в левой части показывает значения пикселей второго изображения (выбранного как Второе изображение) построенных как функцию соответствующих значений пикселей текущего изображения. Когда между данными существует простая взаимосвязь, все точки лежат на одной кривой. Следует отметить, что для больших изображений на графике строится только небольшая случайно выбранная подвыборка данных.

Некоторые простые взаимосвязи могут аппроксимировать данные точек, среди них есть пропорциональная, смещение, линейная или квадратная связь. Параметры аппроксимации рассчитываются моментально и показываются в таблице снизу, при этом строится соответствующий график взаимосвязи. Все значения пикселей используются для аппроксимации даже если показывается небольшое подмножество.



Практически линейная взаимосвязь двух срезов объёмных данных МСМ полученных на разной высоте, показанная и аппроксимированная модулем определения взаимосвязи.

Взаимная корреляция

Обработка данных → Множественные данные → Взаимная корреляция

Модуль находит локальные корреляции между фрагментами двух различных изображений. В идеальном случае выводится сдвиг каждого пикселя первого изображения как показано на втором. Это можно использовать для определения локальных изменений на поверхности, которую сняли дважды (сдвиг может существовать, например, при какой-то деформации образца или неправильной работе микроскопа).

Для каждого пикселя первого операнда (текущего окна) модуль берёт его окрестность и ищет наилучшую корреляцию с вторым операндом внутри заданной области. Положение максимума корреляции используется для задания значения сдвига для вышеупомянутого пикселя первого операнда.

Второй операнд Изображение, которое будет использоваться для сравнения с первым операндом - базовое изображение.

Размер поиска Используется для задания области, где алгоритм будет искать локальную окрестность (на втором операнде). Должно быть больше, чем размер окна. Необходимо увеличить размер, если между сравниваемыми изображениями есть большие различия.

Размер окна Используется для задания размера области локальной окрестности (на первом операнде). Должно быть меньше, чем размер поиска. Увеличение этого значения может улучшить работу модуля, но, разумеется, замедлит расчёт.

Тип вывода Определяет выходной формат (пиксельного сдвига).

Добавить маску порога низкой степени корреляции. Для некоторых пикселей (с не очень ярко выраженной окрестностью) степень корреляции будет низкой везде, но алгоритм всё равно будет выбирать некоторые максимальные значения этой степени. Чтобы увидеть эти точки и возможно убрать их из дальнейшего рассмотрения можно дать модулю установить маску сдвигов пикселей с низкой степенью корреляции, для которых вероятность того, что она определена правильно, невелика.

Поиск по корреляции

Обработка данных → Множественные данные → Поиск по корреляции

Этот модуль ищет заданный фрагмент внутри базового изображения. Он может генерировать изображение уровня корреляции или пометить результирующее положение фрагмента с помощью маски на базовом изображении.

Ядро корреляции Изображение фрагмента которое нужно найти на базовом изображении. Размеры пикселя на обоих изображениях должны соответствовать друг другу.

Использовать маску Если изображение фрагмента содержит маску, то можно включить эту опцию. Только пиксели под маской будут влиять тогда на результат поиска. Это может помочь для выделения фрагментов, которые имеют неправильную форму.

Тип вывода Есть несколько вариантов того. что выводить: локальные максимумы корреляции (отдельные точки), маски с размером ядра для каждого максимума корреляции (хорошо подходят для презентаций) или просто степень корреляции.

Метод корреляции Доступно несколько методов расчёта степени корреляции. Есть два основных класса. Для Корреляции корреляция рассчитывается интегрированием произведения базового изображения и изображения ядра. Для Разницы высоты корреляция рассчитывается как квадрат расстояния между базовым изображением и ядром (с последующей инверсией знака чтобы сделать более высокую оценку лучше). Для обоих методов область изображения, сравниваемая с ядром может использоваться как есть (необработанной), может быть выровнена до общего среднего значения или она может быть выровнена до общего среднего значения и нормализована до одинаковой суммы квадратов, дающих оценку.

Порог Порог для определения, будет ли локальный максимум считаться «фрагмент найден здесь».

Регуляризация Когда области базового изображения локально нормализуются, очень плоские области могут приводить к случайным соответствиям изображению фрагмента и другим странным результатам. Путём увеличения параметра регуляризации вклад плоских участков подавляется.

Обработка нейросетью

Обработку с помощью нейросети можно использовать для расчёта одного типа данных из другого даже если формула или соотношение, описывающие связь между ними, не описаны в явном виде. Соотношение непосредственно встраивается в нейросеть на этапе, называемом обучением, который задействует пары известных

входных и выходных данных, обычно называемых модель и сигнал. В этом процессе сеть оптимизируется таким образом, чтобы воспроизводить настолько точно, насколько это возможно сигнал из модели. Обученная нейросеть затем может быть использована для обработки данных модели, для которых выходной сигнал не известен и получать, обычно несколько приближенно, как сигнал должен выглядеть. Другим возможным применением может быть аппроксимация методов обработки данных, которые являются точными, но требующими значительного времени. В этом случае сигналом будут выходные данные точного метода, и нейросеть обучается воспроизводить их.

Поскольку обучение нейросети и её применение это два совершенно различных шага, они реализованы в Gwyddion как две разные функции.

Обучение нейросети

Обработка данных → Множественные данные → Обучение Нейросети

Основные функции, которые контролируют процесс обучения, содержатся во вкладке Обучение:

Модель Данные модели, т.е. входные данные для обучения. Для обучения можно выбрать несколько моделей последовательно (с соответствующими сигналами).

Сигнал Данные сигнала для обучения, т.е. выходные данные, которые должна выдавать обученная нейросеть. Изображение сигнала должно быть совместимо с изображением модели, т.е. иметь одинаковые размеры в пикселях и физические.

Шагов тренировки Число шагов обучения, которое будет выполнено при нажатии Обучение. Каждый шаг состоит из одного прохода по всем данным сигнала. Можно установить число шагов обучения равным нулю, при этом обучения не будет производиться, но модель будет рассчитана нейросетью, и можно будет наблюдать результат расчёта.

Обучение Начинает обучение. Это сравнительно медленный процесс, особенно при больших размерах поля данных и окна.

Переинициализация Заново инициализирует нейросеть в необученном состоянии. Точнее, это означает, что веса нейронов устанавливаются в случайные значения.

Режим использования маски Можно обучать нейросеть только на подмножестве сигнала, заданным маской на данных сигнала (использование маски на модели будет бессмысленным из-за размеров окна).

Параметры нейросети можно изменить на вкладке Параметры. Изменение как размеров окна, так и числа скрытых узлов означает переинициализацию неросети (как при нажатии кнопки Переинициализировать).

Ширина окна Горизонтальный размер окна. Входные данные для сети состоят из области вокруг пикселя модели, называемой окном. Окно центрируется на пикселе, поэтому предпочтительными являются нечётные размеры.

Высота окна Вертикальный размер окна.

Скрытые узлы Число узлов в «скрытые» слое нейросети. Большее число узлов приводит к более универсальной сети, с другой стороны стороны, оно приводит к замедлению обучения и применения нейросети. Обычно это число является малым по сравнению с числом пикселей окна.

Степень XY источника Степень, с которой единицы измерения пространственных размеров модели должны появляться в сигнале. Используется только при применении нейросети к данным.

Степень Z источника Степень, с которой единицы измерения «высоты» модели должны появляться в сигнале. Используется только при применении нейросети к данным.

Заданные единицы Фиксированные единицы измерения результата. Они комбинируются с другими параметрами единиц измерения, поэтому если вы хотите получить единицы измерения результата независимыми от входных, необходимо установить обе степени в ноль. Используются только при применении нейросети к данным.

Обученную нейросеть можно сохранить. загрузить для переобучения на других данных и т.п. Управление списком сетей похоже на предустановки загрузки сырых данных.

В дополнение к сетям в списке, существует ещё одна неназванная сеть, и это та сеть, которая обучается в текущий момент. Когда вы загружаете сеть, обучаемая сеть становится копией загруженной. Обучение затем не меняет именованные сети; чтобы сохранить сеть после обучения (под уже имеющимся или новым именем) необходимо явно использовать кнопку Сохранить.

Применение нейросети

Обработка данных → Множественные данные → Применить нейросеть

Применить обученную нейросеть просто: нужно выбрать одну из списка и нажать OK. Неименнованная сеть, которая обучается в настоящии момент также присутствует в списке под названием «Обучается».

Поскольку нейросети обрабатывают и производят нормализованные данные, они не сохраняют хорошо соотношения сторон, особенно если масштаб модели, использованной при обучении, сильно отличается от масштаба реальных входных данных. Если выходные данные должны масштабироваться вместе со входными, необходимо включить опцию Масштабировать пропорционально входным данным, которая масштабирует выходные данные пропорционально обратному отношению диапазонов текущих данных и данных, использованных при обучении.

4.21 Магнитно-силовая микроскопия

В измерениях МСМ мы собираем информацию о распределении поля рассеяния над образцом, обычно в одном слое на заданной высоте над образцом в ходе одного измерения. Вместе с этим сигналом мы также собираем информацию о топографии так же, как и в других техниках СЗМ.

Функции для работы с данными МСМ можно найти в меню Обработка данных → Режимы СЗМ → Магнитный. Отдельные модули и алгоритмы обработки данных, описываемые в следующих абзацах, можно разбить на следующие категории:

- вспомогательные функции, такие как преобразование различных величин в градиент силы.
- модули для моделирования отклика МСМ на различные образцы (например, среду для перпендикулярной записи или тонкою полоску плёнки с электрическим током),
- модули основанного на использовании известных образцов анализа зонда и
- набор функций для работы с многоканальными данными, например, данными, измеренными с разнонаправленной намагниченностью зонда.

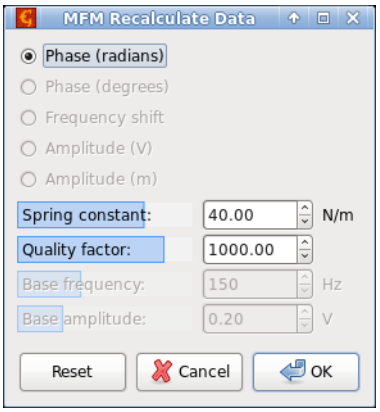
Последняя категория включает в себя функции общего назначения, такие как арифметика над данными, которые могут складывать и вычитать изображения и комбинировать их другими способами используя арифметические выражения, или взаимно кадрировать, которая обрезает изображения до их области пересечения (что обычно требуется до выполнения других операций с множественными данными).

Сложение и вычитание измерений проведённых с двумя разными направлениями намагниченности зонда было предложено как способ потенциально улучшить разделение вкладов от магнитного взаимодействия и других видов взаимодействий [Cambel11]. Если также доступны измерения с различными направлениями протекания тока, то у нас будет четыре возможных варианта того, как будут взаимно ориентированны электростатические и магнитные силы. Все четыре могут комбинироваться с использованием арифметики над данными чтобы подавить шум в данных.

Пересчитать в градиент силы

Функция Пересчитать в градиент силы производит преобразование различных измеренных величин в градиент силы. Входное изображение должно соответствовать одной из величин, для которых данное преобразование реализовано: фазе, сдвигу частоты или амплитуде (в Вольтах или метрах). Тип входных данных определяется автоматически и показывается как выбор входной величины в верхней части окна.

Преобразование требует ввести параметры инструмента и измерения, которые различаются в зависимости от типа входных данных и могут включать в себя константу упругости, добротность или начальную амплитуду.



Снимок экрана модуля преобразования данных МСМ.

Моделирование поля рассеяния и измерений МСМ.

Несколько модулей, различающихся по используемым алгоритмам, моделируют распределение поля рассеяния в плоскости над поверхностью образца. Ни один из них не работает с общим случаем магнитной среды, например, решая уравнения Пуассона для того чтобы найти распределение магнитного поля из объёмной намагниченности образца, поскольку на данный момент этот подход кажется излишне требовательным к вычислительным ресурсам для пакета общего назначения, которым является Gwyddion (по крайней мере на данное время). Модули настроены чтобы моделировать несколько типичных случаев, описанных в литературе, где существует достаточное количество допущений о намагниченности образца, что делает расчёт поля рассеяния доступным с помощью простых методов.

Модуль для работы с перпендикулярной средой основан на работах Х. Хуга (H. Hug) [Hug98] и С. Вока (S. Vock) [Vock11][Vock14]. Распределение поля рассчитывается на основе известного распределения намагниченности в слое, в направлении z намагниченность считается постоянной для каждой точки слоя и меняется исключительно если мы движемся в плоскости слоёв. Изначально намагниченность описывается как двоичное изображение (намагниченность вверх/вниз, заданная маской), к ней можно добавить стенки доменов заданной толщины. Затем расчёты проводятся в Фурье-пространстве. Помимо распределения магнитного поля также могут быть рассчитаны результаты использования простых функций зонда, известных аналитически (точечный заряд, прямоугольный параллелепипед), и численно посчитанные производные получаемых в результате сил.

Предполагая распределение поверхностного заряда $+\sigma(x,y)$ на верхней поверхности среды и противоположный заряд $-\sigma(x,y)$ на нижней поверхности мы можем использовать анализ Фурье для получения распределения поля. Сначала мы преобразуем поверхностные заряды в Фурье-пространство:

$$A_M(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{kr}} \mathrm{d}\mathbf{r}$$

Опционально мы можем даже предположить, что между доменами существуют блоховские стены некоторой толщины δ_w, делая свёртку $\sigma(x,y)$ перед расчётом с оператором размытия

$$f(x,y) = 1 \big/ \cosh \frac{\pi\sqrt{x^2+y^2}}{\delta_\mathrm{w}},$$

, где толщина стенки может быть выражена через постоянную обменной жесткости A и постоянную одноосевой анизотропии K_u как

$$\delta_\mathrm{w} = \pi\sqrt{A/K_\mathrm{u}}$$

Затем можно рассчитать Фурье-компоненты поля рассеяния на высоте z, создаваемого верхней и нижней поверхностями плёнки толщиной d как

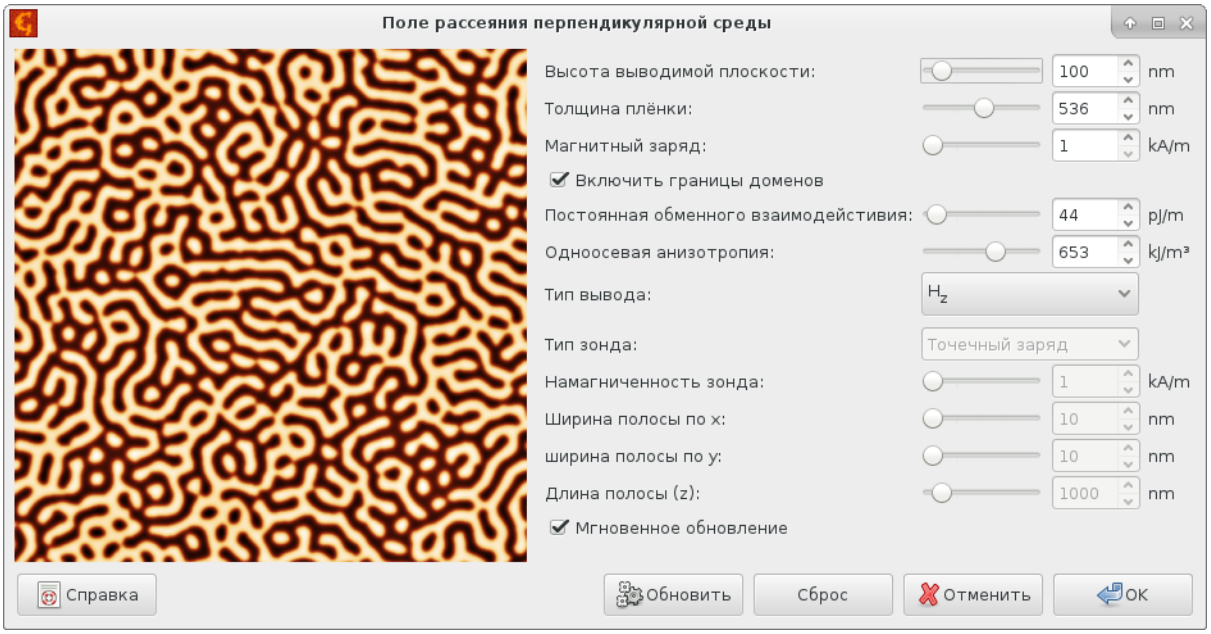
$$A^{z,d}_{H_{x,y}}(\mathbf{k}) = \mathrm{i}\frac{\mathrm{e}^{-kz}\left(1-\mathrm{e}^{-kd}\right)k_{x,y}}{2k} A_M(\mathbf{k})$$
$$A^{z,d}_{H_z}(\mathbf{k}) = \frac{\mathrm{e}^{-kz}\left(1-\mathrm{e}^{-kd}\right)}{2} A_M(\mathbf{k})$$

Применив обратное преобразование Фурье можно получить магнитное поле рассеяния над образцом:

$$H_{x,y}(\mathbf{r},z) = \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} A_{H_{x,y}}^{z,d} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{kr}} \mathrm{d}\mathbf{k}$$
$$H_z(\mathbf{r},z) = \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} A_{H_z}^{z,d} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{kr}} \mathrm{d}\mathbf{k}$$

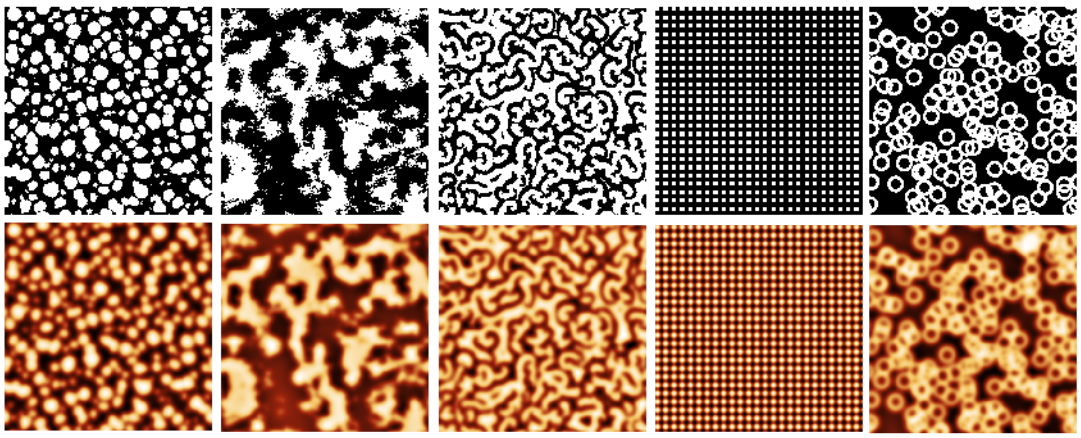
оставаясь в Фурье-пространстве можно рассчитать силу, действующую на простой зонд в форме бруска сечением $b_x \times b_y$, длиной L и намагниченностью M_t, умножая длину компонент поля рассеяния $A_{H_z}^{z,d}$ на аналитическую функцию передачи силы:

$$\mathrm{FTF}(\mathbf{k}) = -\frac{4\mu_0 M_t}{k_x k_y}\left(1-\mathrm{e}^{-kL}\right)\sin\frac{k_x b_x}{2}\sin\frac{k_y b_y}{2}$$



Снимок экрана модуля моделирования магнитного поля над поперечной средой

Поскольку Gwyddion способен не только работать с измеренными данными, но и синтезировать множество различных искусственных поверхностей, существует множество подходов к работе с модулем моделирования перпендикулярной среды, создавая различные поля от более или менее реалистичных образцов. Следующий рисунок демонстрирует несколько примеров таких модельных масок и получаемых в результате данных.



Результат работы модулей синтеза поверхностей, использованных для моделирования данных МСМ перпендикулярной среды: плёнка в виде колонн, фрактальная шероховатость, домены в модели Изинга, решетка, бублики.

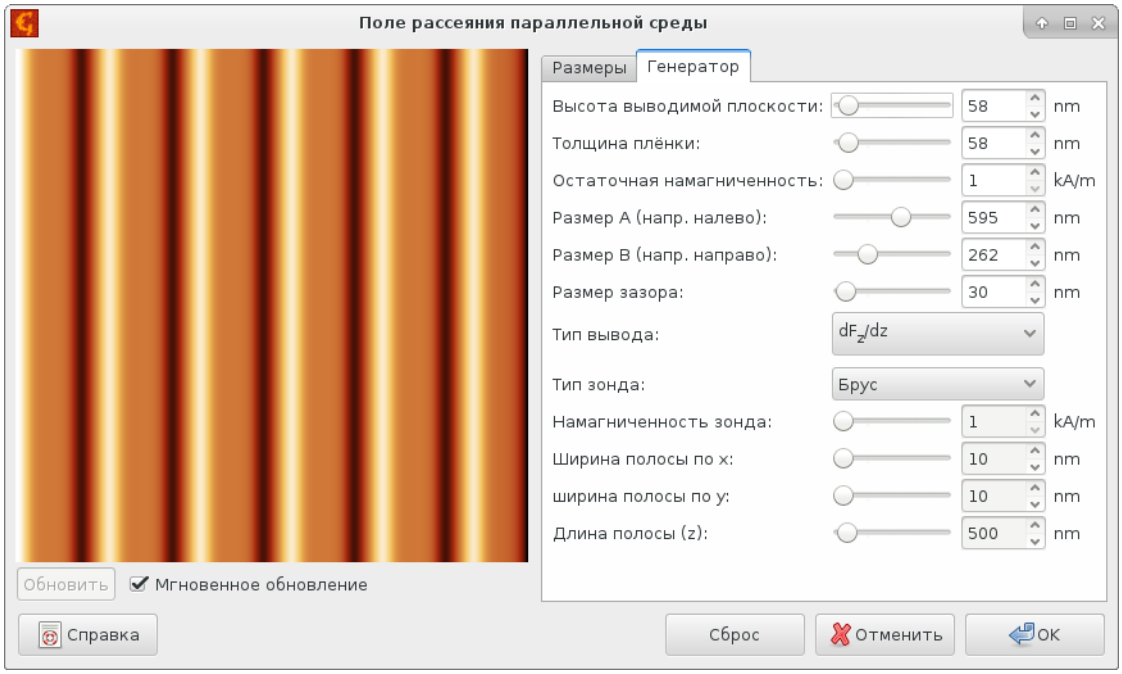
Для параллельной среды диапазон возможных расчётов гораздо меньше — основываясь на аналитической модели можно рассчитать поле над полосами, ориентированными в левом и правом направлении (подобно жесткому

диску). Это основывается на работе [Rugar90], дающей следующий набор уравнений для отдельных преобразований

$$B_x(x,z) = \frac{\mu_0 M_r}{\pi}\left(\operatorname{atan}\frac{x(d+z)}{x^2+a^2+a(d+z)} - \operatorname{atan}\frac{xz}{x^2+a^2+az}\right)$$
$$B_z(x,z) = \frac{\mu_0 M_r}{2\pi}\ln\frac{x^2+(d+z+a)^2}{x^2+(z+a)^2}$$

где M_r это остаточная намагниченность магнитного слоя, z расстояние от зонда до слоя, a ширина переходного слоя и d толщина слоя.

Полосы не обязательно должны быть одинакового размера. В результате могут быть построены интенсивности полей в направлении осей x и z и рассчитана сила в направлении z, основанная на известных передаточных функциях зонда (таких же, как и для перпендикулярной среды). Также могут быть (численно) рассчитаны её производные.



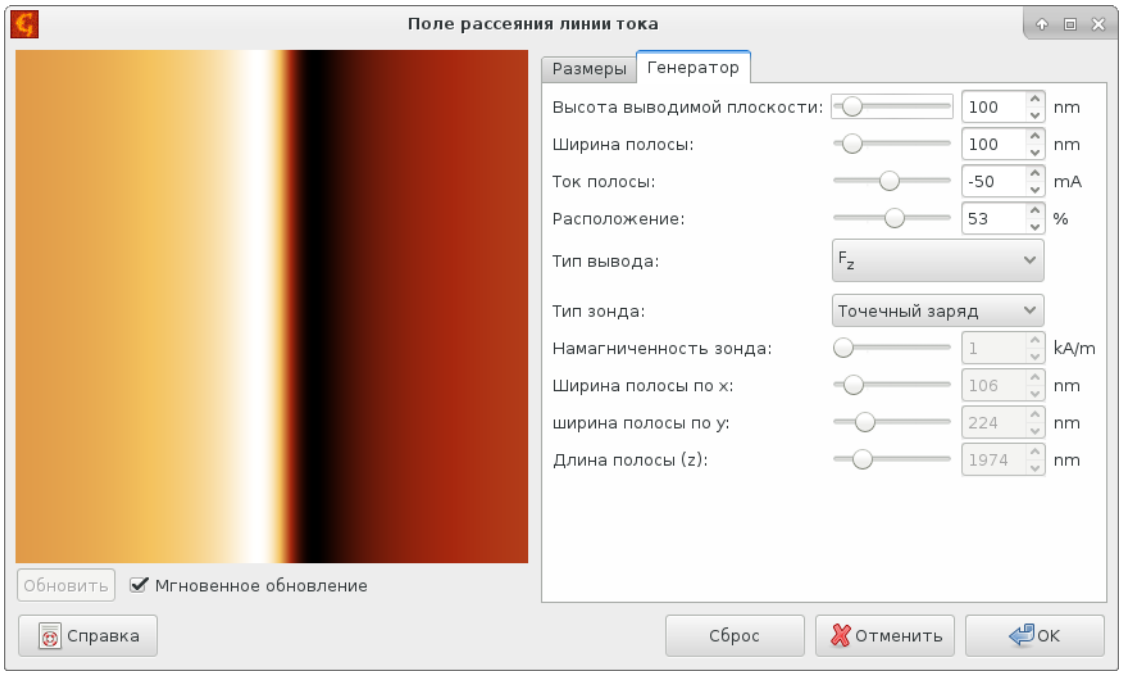
Снимок экрана модуля моделирования магнитной среды с параллельной записью

Подобным же образом аналитические выражения можно использовать для моделирования поля над тонким проводником с текущим по нему током. Для этого можно использовать модуль поле линии тока, основанный на уравнении из [Saida03]:

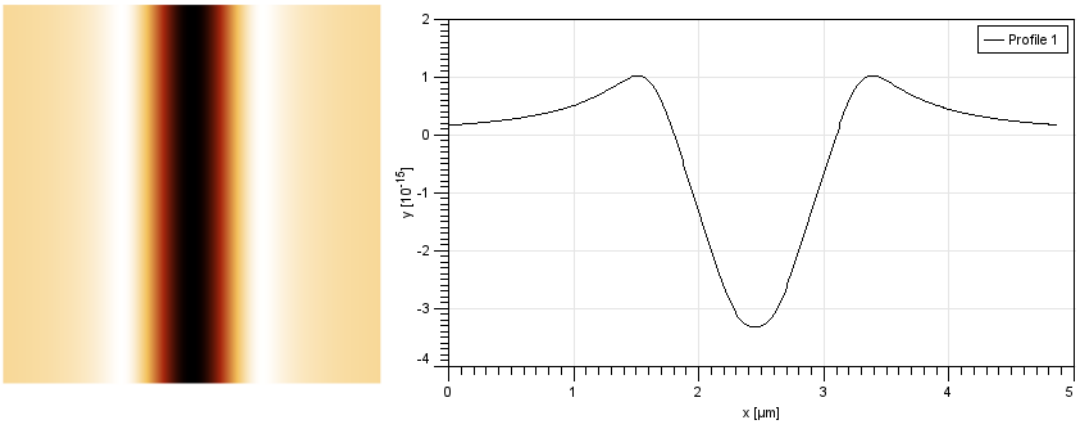
$$B_x(x,z) = \frac{\mu_0 I}{2\pi w}\operatorname{atan}\frac{wz}{z^2+x^2-w^2/4}$$
$$B_z(x,z) = \frac{\mu_0 I}{4\pi w}\ln\frac{(x-w/2)^2+z^2}{(x+w/2)^2+z^2}$$

для полосы шириной w по которой течёт ток I.

Поскольку все модули моделирования могут также использоваться для добавления результата к имеющимся данным, вызывая модуль несколько раз мы можем также моделировать плоскую катушку (или, точнее, две линии с противоположным направлением тока). Это показано на следующих рисунках.



Снимок экрана модуля моделирования магнитного поля линии тока



Распределение поля рассеяния над двумя параллельными линиями тока с противоположными направлениями его протекания.

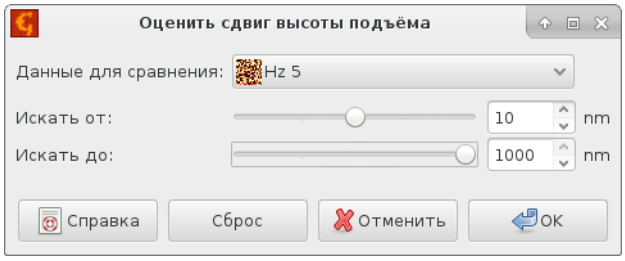
Алгоритмы для расчёта поля рассеяния с помощью преобразования Фурье могут также использоваться чтобы сдвигать поле с одной высоты слоя на другую. Это работает если мы удаляемся от образца (размывая данные), но это не даёт хороших результатов если мы приближаемся к образцу (расчёт расходится). Основываясь на [Hug98] процедура должна быть следующей:

1. Поле $H_z(\mathbf{r})$ пересчитывается преобразованием Фурье в его спектральную интерпретацию $A_{H_z}(\mathbf{k})$,
2. Спектральные компоненты умножаются на масштабирующий множитель $\exp(kd)$ где d расстояние между двумя плоскостями (положительное или отрицательное),
3. Обратное преобразование Фурье используется чтобы получить значения поля в нормальном пространстве.

Можно поиграть с этим алгоритмом в модуле сдвига поля как показано на следующем рисунке.

Снимок экрана модуля смещения поля рассеяния

Подобный подход может использоваться для обратной операции — оценки разницы высоты сканирования между двумя наборами данных. Здесь используется простая техника поиска прямым перебором чтобы найти сдвиг в направлении z, который будет давать наилучшее соответствие двух окликов МСМ. Интерфейс пользователя показан на рис. 8. Потенциальным применением данного модуля может быть поиск реальной высоты подъёма вместо указанной, хотя здесь могут проявляться проблемы на реальных данных при наличии каких-то паразитных взаимодействий.



Снимок экрана модуля оценки сдвига поля.

Разрешение зонда и передаточная функция

Несколько подходов по решению проблем с разрешением зондов МСМ было предложено. Можно анализировать профили поперёк перпендикулярного образца или использовать спектр мощности для оценки разрешения зонда, т.е. пытаясь найти, где спектр мощности исчезает до уровня шума. См. Оценку передаточной функции для описания метода оценки передаточной функции, реализованного в настоящее время в Gwyddion. Эта техника в действительности не является специфичной для МСМ и может быть использована универсально для оценки передаточной функции ПФ (или функции рассеяния точки PSF) в любом режиме СЗМ, если можно записать или смоделировать пример идеального отклика. Математические и алгоритмические детали о том, как данные магнитных измерений обрабатываются в модулях работы с передаточной функцией можно найти в статье Nečas19.

Пример количественного протокола обработки данных МСМ

Чтобы проиллюстрировать всю процедуру получения количественных результатов измерения МСМ мы приводим ниже пример оценки передаточной функции на известном образце и и обработку данных, полученных с неизвестного образца, основанную на этой передаточной функции.

Началом процесса будет использование данных, измеренных на известном образце. Здесь использовался многослойный образец, изготовленный IFW Dresden, для которого поле рассеяния над образцом может быть рассчитано на основе известного распределения доменов и известных свойств образца. Вместе с ними доступны

тестовые данные «неизвестного» образца, предоставленного National Physical Laboratory, которые доступны для скачивания в одном входном файле.

Чтобы пройти процедуру шаг за шагом и получить такие же результаты, как представлены в файле с обработанными данными, необходимо пройти следующую последовательность шагов:

Ссылки

[Hug98] H. J. Hug, B. Stiefel, P. J. A. van Schendel, A. Moser, R. Hofer, S. Martin, H.-J. Gutherodt, S. Porthun, L. Abelmann, J. C. Lodder, G. Bochi and R. C. O'Handley: J. Appl. Phys. (1999) Vol. 83, No. 11

[Vock11] S. Vock, Z Sasvari, C. Bran, F. Rhein, U. Wolff, N. S. Kiselev, A. N. Bogdanov, L. Schiltz, O. Hellwig and V. Neu: IEEE Trans. on Magnetics, 47 (2011) 2352

[Vock14] S. Vock, C. hengst, M. Wolf, K. Tschulik, M. Uhlemann, Z. Sasvari, D. Makarov, O. G. Schmidt, L Schultz and V. Neu: Appl. Phys. Lett 105 (2014) 172409

[Rugar90] D. Rugar, H. J. Mamin, P. Guethner, S. E. Lambert, J. E. Stern et al.: J. Appl. Phys. 68 (1990) 1169

[Saida03] D. Saida, T. Takahashi: Jpn. J. Appl. Phys. 42 (2003) Pt. 1, No. 7B

[Cambel11] V. Cambel, D. Gregusova, P. Elias, J. Fedor, I. Kostic, J. Manka, P. Ballo: Journal of Electrical Engineering, 62 (2011) 37–43

[Necas19] D. Nečas, P. Klapetek, V. Neu, M. Havlíček, R. Puttock, O. Kazakova, X. Hu, L. Zajíčková, Scientific Report, 9 (2019) 3880

4.22 Обработка графиков

Многие из модулей обработки данных создают графики в результате своей работы. Графики можно экспортировать в текстовый файл или продолжать анализировать их в Gwyddion с помощью нескольких модулей обработки графиков. Эти модули доступны в меню График основного окна Gwyddion. Следует заметить, что число модулей обработки графиков на данный момент невелико, и они состоят в основном из простейших модулей для операций, которые часто встречаются при анализе данных СЗМ. Для более сложных аналитических операций лучше использовать вашу любимую программу для обработки графиков.

В этой секции кратко описываются имеющиеся в Gwyddion модули обработки графиков.

Базовые операции

Прежде всего, функции масштабирования и чтения данных доступны непосредственно в окне графика:

- Логарифмический масштаб осей – горизонтальные и вертикальные оси могут переключаться между линейным и логарифмическим режимом с использованием кнопок логарифмического масштаба. Переключение на логарифмический масштаб доступно только для положительных значений (либо по абсциссе, либо по ординате).
- Увеличение и уменьшение масштаба – после выбора режима приближения можно нарисовать мышью область, которую нужно увеличить. Уменьшение восстанавливает тот масштаб, при котором видны все данные.
- Измерение расстояний – позволяет выбрать несколько точек на графике и показать расстояния и углы между ними.

Перевернуть график

Перевернуть график переворачивает график вертикально. Другими словами, ордината инвертируется, при этом абсцисса остаётся нетронутой. Функция непосредственно меняет данные кривой, она не затрагивает только презентацию данных.

Инвертировать график

Инвертировать график переворачивает график горизонтально. Другими словами, абсцисса инвертируется, при этом ордината остаётся нетронутой. Функция непосредственно меняет данные кривой, она не затрагивает только презентацию данных.

Обрезать график

Обрезать график – очень простой модуль, который обрезает кривые графиков до выбранного диапазона (либо заданного численно, либо выбранного на графике с помощью мыши) и создаёт новый график. Если выбрано Обрезать все кривые, все кривые обрезаются и переносятся на новый график, в противном случае операция применяется только к выбранной кривой.

Выравнивание графиков

Выравнивание графика – очень простой модуль, который на данный момент производит линейную аппроксимацию каждой из кривых графика и вычитает аппроксимирующую линейную функцию из них.

Подровнять

Функция подровнять сдвигает кривые графиков горизонтально таким образом, чтобы максимизировать их взаимные корреляции, т.е. чтобы общие особенности кривых соответствовали друг другу. Это может быть полезным, например, для сравнения профилей, снятых в разных местах образца.

Объединение и усреднение графиков

Две простые функции комбинируют данные всех кривых в одну, которая добавляется к построенному графику. Они немного отличаются подходом к усреднению данных.

Объединить кривые Просто собирает данные со всех кривых. Она объединяет две точки данных если абсциссы их совпадают, усредняя ординаты. Результирующая кривая вследствие этого обычно колеблется между точками, принадлежащим входным кривым если они слегка смещены друг относительно друга по вертикали.

Усреднить кривые пытается объединить близкие точки, усредняя как ординаты, так и абсциссы. Обычно получаемая в результате кривая имеет то же (или слегка большее) число точек, что и входная кривая, не все они вместе. Она также должна быть заметно более гладкой по сравнению с кривой, получаемой в результате объединения, хотя иногда и на ней могут оставаться заметные колебания.

Логарифмический масштаб

Элементы управления окном графика позволяют переключаться между линейным и логарифмическим масштабом осей. Однако, для аппроксимации зависимостей наподобие степенных может оказаться полезно физически преобразовать данные взятием логарифма от значений. Функция преобразования графика в логарифмический масштаб осуществляет такое преобразование. Можно выбрать, какую из осей нужно преобразовать (x, y или обе), что делать с неположительными значениями, если они появляются, и выбрать основание логарифма. После этого создаётся новый график и все кривые преобразуются заданным образом.

Экспорт графиков кривых

Данные графиков кривых могут быть экспортированы в текстовые файлы с использованием меню Экспортировать текст. Диалоговое окно экспорта позволяет выбрать между несколькими вариантами стилей, которые потом проще импортировать в другие пакеты программного обеспечения. Опции Экспорт меток, Экспорт единиц измерения и Экспорт метаданных позволяют добавить строки с дополнительной информацией перед блоком числовых данных. Это может оказаться полезным как напоминание, какие данные содержал исходный файл, но может вызывать проблемы при чтении файла другим программным обеспечением.

Опция Формат чисел POSIX принудительно заставляет использовать стандартное машиночитаемое научное представление чисел с десятичной точкой. В противном случае значения записываются в соответствии с настройками текущей локали (офисное программное обеспечение может более охотно читать такой формат, научное программное обеспечение обычно поддерживает его хуже).

Другой важной опцией, которая влияет на структуру всего файла является Общая объединённая абсцисса. По умолчанию отдельные кривые записываются в файл последовательно, разделённые пустыми строками. Если эта опция включена, экспорт кривых записывает единую таблицу с несколькими столбцами, представляющими

данные всех кривых, и общую абсциссу первым столбцом. Если кривые не были дискретизированы одинаково, некоторые строки будут естественно содержать значения только для части кривых, где они определены. Экспортируемый файл с двумя отдельными кривыми может выглядеть следующим образом:

```
0.1  3.32e6
0.2  3.80e6
0.4  4.15e6

0.0  11.1
0.3  9.66
0.4  9.70
```

в то время, как с общей объединённой осью абсцисс те же данные будут сохранены как:

```
0.0  ---  11.1
0.1  3.32e6  ---
0.2  3.80e6  ---
0.3  ---  9.66
0.4  4.15e6  9.70
```

Также можно экспортировать векторное (EPS) или растровое (PNG) графическое представление графика используя пункты меню Экспортировать PostScript или Экспортировать растр. Однако, эти опции предоставляют достаточно ограниченные возможности. Gwyddion не является специальным программным обеспечением для построения графиков, и если вам нужны красивые графики, лучше использовать то, которое является – например, gnuplot или matplotlib.

Статистика

Модуль статистики графика показывает сводную информацию о полной кривой графика или о выбранных диапазонах. Диалоговое окно показывает две основные группы величин, которые вычисляются различным способом.

Простые параметры рассчитываются из набора значений ординат, никак не учитывая абсциссы. Это важно иметь в виду в том случае, когда кривая дискретизирована неравномерно, т.е. расстояние между значениями по оси абсцисс меняется, возможно сильно. Часть кривой, в которой точки дискретизации идут более плотно, будет оказывать более сильное влияние на результат. Доступные параметры включают в себя базовые характеристики с тем же значением, что и для двумерных данных. Некоторые из них также совпадают с основными параметрами шероховатости, которые рассчитываются инструментом Шероховатость.

С другой стороны Интегралы получаются интеграцией по правилу трапеций (или с помощью похожей аппроксимации). Следовательно, более длинные интервалы вносят больший вклад в результат. Доступные величины включают в себя:

Длина проекции Длина выбранного диапазона (или полный диапазон значений по оси абсцисс, если диапазон не выбран).

Длина полного профиля Сумма длин линейных сегментов, соединяющих точки кривой.

Вариация Интеграл модуля производной - рассчитывается как сумма модулей попарных разностей значений ординаты.

Среднее значение Площадь под кривой делённая на длину проекции.

Площадь под кривой Полный интеграл (сумма положительной и отрицательной площади).

Положительная площадь Интеграл под отрезками кривой, где она положительна.

Отрицательная площадь Интеграл под отрезками кривой, где она отрицательна.

Среднеквадратичное Интеграл возведённых в квадрат значений делённый на длину проекции кривой.

Статистические функции

Одномерные статистические функции рассчитываются для графиков используя те же самые определения, что и для изображений. Они подробно описаны в разделе Инструмент статистические функции. Доступные функции включают в себя распределения высот и углов, функцию автокорреляции, функцию корреляции высота-высота

и функцию спектральной плотности мощности. Они могут быть расчитаны для выбранной кривой или для всех кривых сразу если включена опция Все кривые.

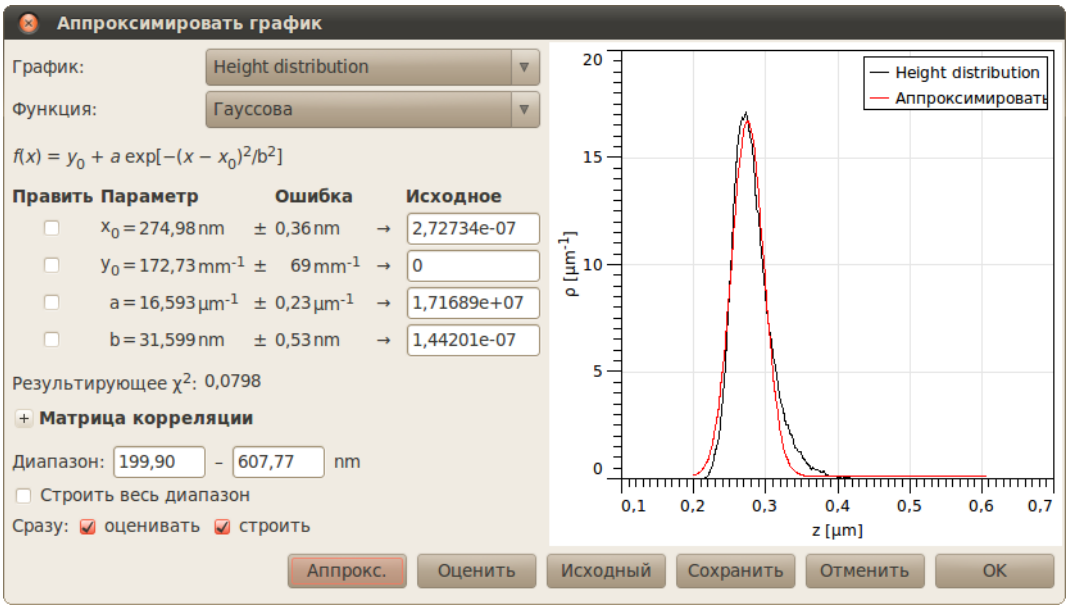
Главное различие между изображениями и графиками состоит в том, что кривые графика не обязательно должны иметь равномерные интервалы между значениями абсцисс (равномерную дискретизацию). В этом случае кривая будет заново дискретизирована при расчёте статистических функций на равномерно распределенные интервалы. Шаг между отсчётами по умолчанию берётся таким, чтобы сохранить количество точек. Однако, это можно изменить используя опцию Избыточная дискретизация, которая задаёт насколько больше точек новая кривая должна иметь по сравнению с оригинальной. Иногда может быть полезно использовать избыточную дискретизацию больше 1 даже для кривых графиков с правильными интервалами между точками.

Аппроксимировать функцией

Аппроксимация функцией разрабатывалась для аппроксимации данных статистическими функциями, используемыми при оценке параметров шероховатости. Следовательно, большая часть доступных здесь функций является статистическими функциями поверхностей с гауссовой или экспоненциальной функцией автокорреляции. Тем не менее, здесь доступно несколько распространённых функций общего назначения. Подробнее они описаны в списке аппроксимирующих функций.

В модуле аппроксимации можно задать область, на которой будет производиться аппроксимация (с помощью мыши или численно), сначала надо задать начальные параметры или дать модулю самому угадать их, и, затем, можно аппроксимировать данные используя алгоритм Левенберга – Маркардта.

В результате получается аппроксимированная кривая и набор её параметров. Отчёт об аппроксимации можно сохранить в файл используя кнопку Сохранить. Нажатие кнопки OK добавляет аппроксимирующую кривую к графику, если это нежелательно, закройте диалоговое окно с помощью кнопки Отмена.



Диалоговое окно аппроксимации кривой

Аппроксимировать кривую сила-расстояние

Модуль аппроксимации кривых сила-расстояния весьма похож на модуль аппроксимации любых кривых, он просто специально сделан для данного типа кривых. На настоящий момент модуль может использоваться для аппроксимации части со скачком на кривой сила-расстояния (которая показывает силы притяжения) используя различные модели:

- силу Ван-дер-Ваальса между полусферой и полупространством
- силу Ван-дер-Ваальса между пирамидой и полупространством
- силу Ван-дер-Ваальса между усечённой пирамидой и полупространством
- силу Ван-дер-Ваальса между сферой и полупространством

- силу Ван-дер-Ваальса между двумя сферами
- силу Ван-дер-Ваальса между конусом и полупространством
- силу Ван-дер-Ваальса между цилиндром и полупространством
- силу Ван-дер-Ваальса между параболоидом и полупространством

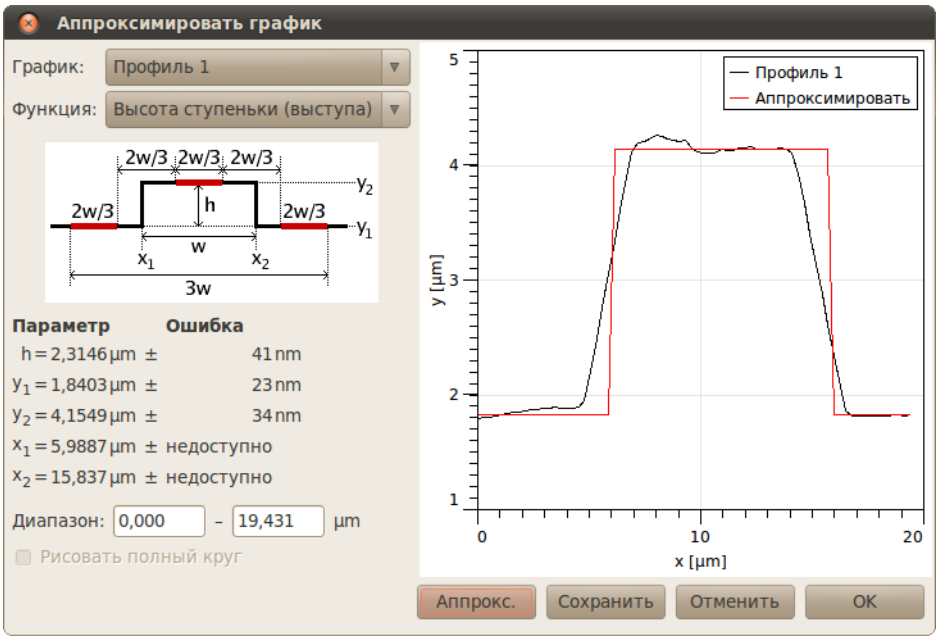
Следует отметить, что аппроксимируемая кривая должна быть именно кривой сила-расстояние, а не смещение-расстояние или сигнал датчика-расстояние. Пересчёт отклонения кантелевера в силу должен быть сделан до вызова этого модуля.

Также следует отметить, что для кантелеверов с малой постоянной упругости количество полезных данных в области притяжения ограничено эффектом перескока в состояние контакта.

Габаритный размер

Модуль определения габаритных размеров можно использовать для аппроксимации некоторых «типичных» объектов, которые можно встретить на профилях полученных с микросхем и похожих на них объектов. Эти объекты обнаруживаются на графике, после чего рассчитываются их свойства.

Интерфейс модуля практически ничем не отличается от модуля аппроксимации функциями.



Диалоговое окно модуля определения габаритных размеров.

Спектр плотности состояний

Модуль расчёта спектра плотности состояний предназначен для расчёта этих спектров из ВАХ туннельного контакта между СТМ-зондом и локальной точкой поверхности. Он рассчитывает

$$\left| \frac{\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}U}}{\frac{I}{U}} \right| (U)$$

и строит полученную функцию в виде графика.

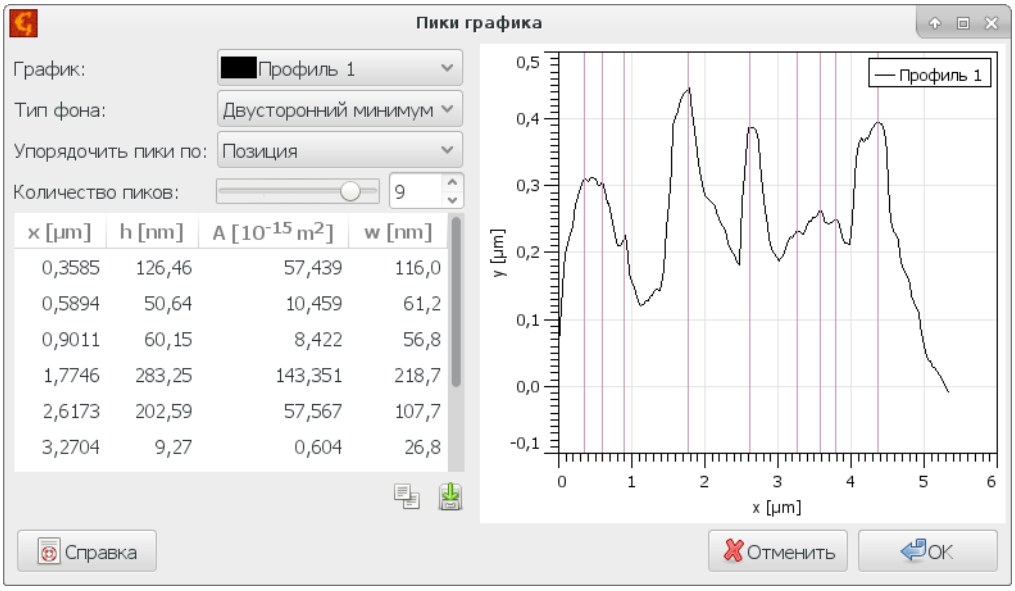
Найти пики

Наиболее выделяющиеся пики на кривых графиков можно автоматически выделять с точностью, превышающей точность дискретизации. Можно задать число наиболее выделяющихся пиков как Количество пиков и функция выделит их на графике. Выделение пиков зависит от их высоты, площади и расстояний до других пиков. Обычно представление данной функции о наиболее выделяющихся пиках неплохо совпадает с ручным выбором. Если вам

не нравится текущий выбор, можно увеличить количество пиков и игнорировать ненужные. Также возможно искать отрицательные пики, т.е. впадины, включив опцию Инвертировать (найти впадины).

Таблица всех пиков показывается в левой части отсортированной в соответствии с выбором опции Упорядочить пики по.... Сортировка по положению означает что пики будут перечислены в том же порядке, как они показаны на графике слева направо. Сортировка по выдающести означает, что наиболее выделяющиеся пики будут показаны первыми.

Для каждого пика показывается несколько его основных характеристик: положение (абсцисса) x, высота h, площадь A и ширина (или отклонение) w. Положение определяется по квадратичному субпиксельному уточнению максимума пика. Остальные значения зависят от того, как определён фон у пика. Возможные варианты включают в себя Нуль, означающий что за основание пика всегда будет браться уровень нуля, и Двусторонний минимум, что означает что фоном пика будет функция гладкой ступени проходящая через ближайшие минимумы кривой слева и справа от пика.



Снимок экрана для автоматического определения пиков на графике для кривой распределения высоты.

Период/шаг

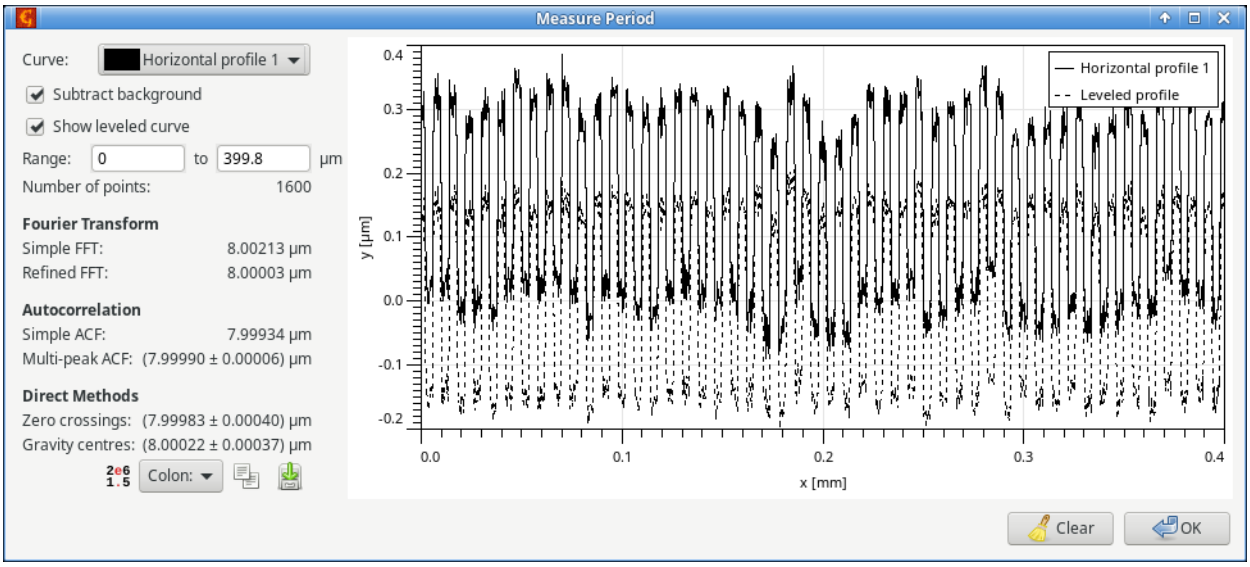
Существует много методов измерения периода/шага периодических профилей, таких как решетки. Модуль измерения периода на графиках реализует несколько из них (см. ссылку [1] для их описания). Лоя достаточно хорошо измеренной решетки все хорошие методы

- Уточненное преобразование Фурье
- Многопиковая АКФ
- Пересечение нуля
- Центры притяжения

должны давать сравнимые результаты, но при этом они отличаются чувствительностью к различным артефактам в данных. Уточненное преобразование Фурье это наиболее устойчивый метод для нечетных форм повторяющихся элементов. Однако, он не предоставляет никакой оценки ошибок.

Два базовых метода также включены, простое преобразование Фурье и простая АКФ, которые просто находят положение основного пика на спектре мощности или АКФ. Они не должны использоваться для оценки и представлены в основном для полноты.

Если профиль был уже правильно выровнен и выбрана нулевая линия, функция может рассчитать данные для профиля без всякой предобработки. В противном случае, нужно включить опцию Вычесть фон чтобы убрать фон на основе хорошо определенной процедуры (см. снова [1]). В этом случае опция Показать выровненную кривую может использоваться чтобы показать обработанный профиль наряду с не модифицированными данными.

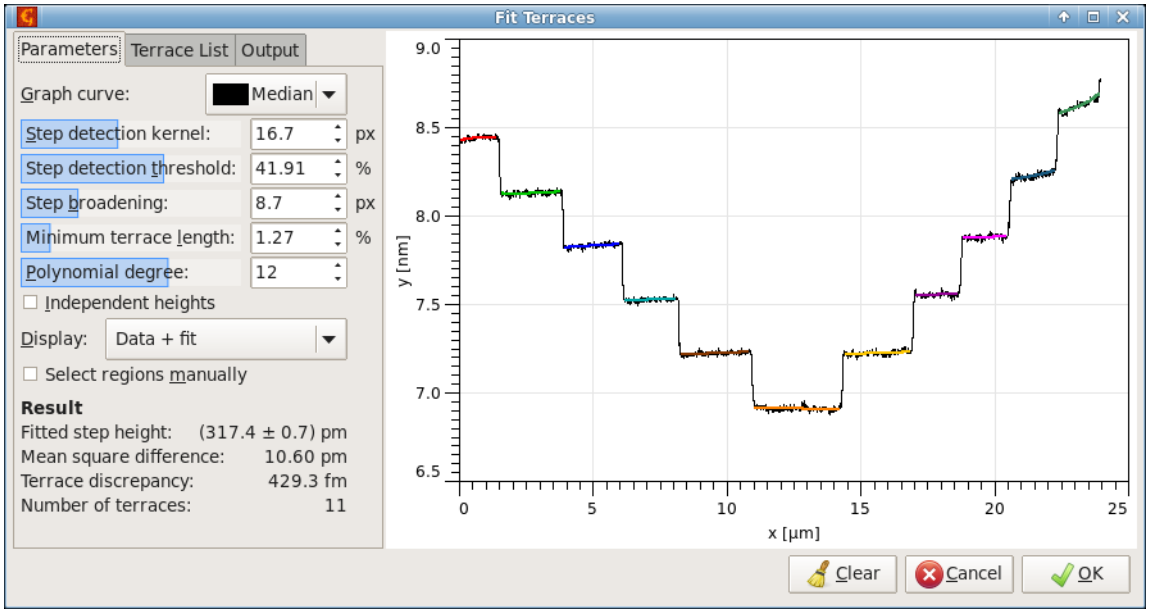


Измерение периода решетки.

Террасы

Террасы или структуры по типу амфитеатров могут быть измерены используя одномерные профили так же, как они измеряются по данным изображения в модуле Террасы. Модули для графиков и для изображений почти идентичны. Следовательно, дальнейшее описывает только основные различия:

- Ядро поиска ступени и уширение будут одномерными. Они по прежнему измеряются в пикселях, что соответствует среднему расстоянию между точками кривой. Минимальная площадь террасы заменяется минимальной длиной, измеренной как доля всего диапазона абсцисс.
- Отсутствует опция использования маски. Вместо этого, террасы могут быть выделены вручную на графике с помощью мыши если опция Выбрать области вручную включена.
- Присутствует дополнительный выбор в меню Показать, Детекция ступеней. Он показывает результат работы фильтра поиска краёв и показывает выбранный порог используя красную пунктирную линию. Это один из наиболее полезных графиков при настройке параметров.
- Площадь в пикселях A_{px} заменяется на N_{px}, количество точек кривой, из которых состоит терраса.



Измерение террасы из профиля высоты, демонстрирует помеченные террасы для структуры амфитеатра сформированной атомарными ступенями кремния.

Источники

[1] D. Nečas, A. Yacoot, M. Valtr, P. Klapetek: Demystifying data evaluation in the measurement of periodic structures. Measurement Science and Technology 34 (2023) 055015, 10.1088/1361-6501/acbab3

4.23 Обработка объёмных данных

На данный момент в Gwyddion доступны некоторые основные функции для визуализации объёмных данных и извлечения из них данных меньшей размерности (изображений, кривых). Также доступны несколько специализированных функций, нацеленных на обработку объёмных данных как массива кривых (или спектров) в каждой точке. Они представлены в меню Объёмные данные окна инструментов.

Объёмные данные часто интерпретируются в Gwyddion как набор кривых, каждая из которых присоединена к одной точке плоскости xy, или, в альтернативном представлении как стек изображений вдоль оси z. Это означает, что функции работы с объёмными данными могут работать с осью z особым образом. Если вы собираетесь импортировать в Gwyddion объёмные данные с двумя пространственными осями и одной особой осью, делайте это так, чтобы особая ось соответствовала оси z.

Основные операции

Основные операции с объёмными данными включают в себя:

Единицы измерения и размеры Меняет физические размеры, единицы измерения, масштаб значений, а также смещения в пространстве. Может оказаться полезным для корректировки необработанных данных, которые были импортированы с некорректными физическими масштабами или как простой способ заново откалибровать вручную размеры поля данных и масштаб значений.

Инвертировать значение Эта функция инвертирует знак всех значений в блоке объёмных данных.

Извлечь изображение предпросмотра Изображение предпросмотра для объёмных данных копируется в новое изображение в файле. Нередко такое же изображение, как изображение предпросмотра, можно получить с помощью модулей Вырезать или Характеризовать профили. Использование этих модулей даёт изображения с точно определёнными характеристиками. Однако, если вам просто нужно изображение предпросмотра, каким бы оно ни было, данная функция позволяет его получить.

Поменять местами оси Поскольку ось z трактуется несколько отлично от плоскости xy, иногда может оказаться полезно поменять местами роли осей. Данная функция поворачивает и зеркально инвертирует объемные данные таким образом, чтобы любая из текущих осей x, y и z могла стать выбранной осью в декартовых координатах для преобразованных данных.

Диалоговое окно обеспечивает, что преобразование будет невырожденным. Если попробовать получить преобразование, которое будет вырожденным, другая ось меняется таким образом, чтобы предотвратить вырождение. Другими словами, можно делать любую комбинацию зеркальных отражений и поворотов на углы, кратные прямому вокруг осей в декартовом пространстве.

Если объёмные данные содержат калибровку для оси z, и данная ось становится какой-то другой, то калибровка будет утеряна. Если такое происходит, показывается предупреждение.

Калибровка оси Z В том случае, когда ось z не является пространственной, дискретизация вдоль неё может быть неравномерной, в отличие от осей построения изображения x и y, которые всегда имеют регулярные интервалы между значениями данных. В Gwyddion это представляется путём присоединения отдельного одномерного блока данных, связанного с осью z, который называется калибровкой Z.

Эта функция может показывать калибровку оси Z, удалить её, извлечь в виде кривой графика, перенести калибровку с других объёмных данных или присоединить новую калибровку из текстового файла. Для присоединения калибровки каждая строка файла должна содержать одно значение, задающее истинное значение zдля соответствующей плоскости, и, естественно, число строк файла должно соответствовать количеству плоскостей изображений в объёмных данных.

Извлечение изображений и профилей

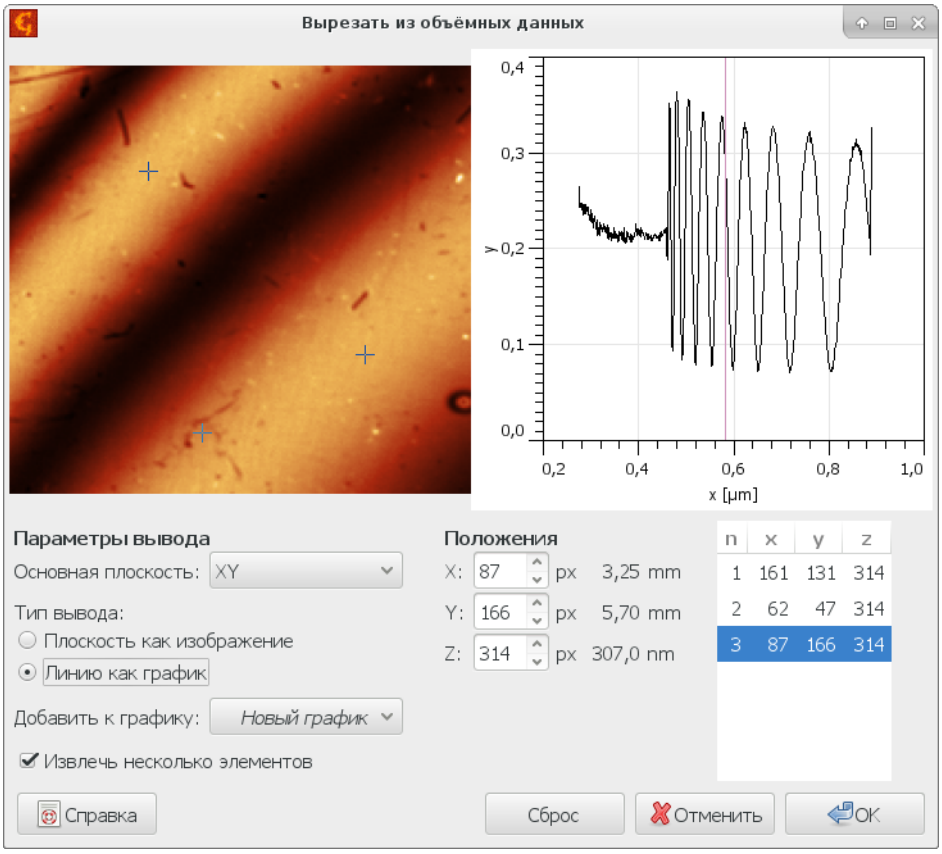
Профили вдоль каждой из осей и перпендикулярные любой из осей сечения в виде изображений можно извлечь из объёмных данных с помощью пункта меню Объёмные данные → Вырезать.

Изображение в выбранной плоскости сечения, именуемое Базовой плоскостью, всегда показывается в левой части и профиль вдоль перпендикулярной плоскости оси показывается в правой части диалогового окна. Можно изменить какой из профилей отображать перемещая выделенную точку по изображению. В обратную сторону это также работает, выбирая точку на графике профиля вы меняете положение плоскости сечения по этой оси. Также все три координаты, задающие положение плоскости и сечения можно ввести численно как X, Y и Z (в координатах пикселей).

Можно выбрать между извлечением изображений и профилей меняя тип вывода. Изменение этого параметра влияет на то, будет ли извлечено изображение слева или профиль справа после того, как пользователь нажмёт OK.

Также можно извлекать несколько профилей или плоскостей изображений одновременно. Если активирован пункт Извлечь несколько элементов, справа появится список выбранных точек. В этом случае тип вывода влияет на выбранное. В режиме Плоскость как изображение можно выбрать только одну точку на изображении (определяющую профиль, показываемый в окне графика), но несколько точек на графике, которые будут задавать по одной плоскости сечения каждая. И наоборот, в режиме Линия как график можно выбрать только одну точку на графике (задающую показываемую слева плоскость), но несколько точек на изображении, задающих места где будут извлечены профили.

Переключение между типами вывода при включенном выборе нескольких элементов уменьшает количество выбранных наборов координат до одного. Также можно использовать кнопку Сброс чтобы уменьшить выбор до одной точки, заданной по умолчанию, если вы хотите начать выбор заново.



Снимок экрана модуля обработки объёмных данных Вырезать, демонстрирующий одновременное извлечение трёх профилей вдоль оси z.

Экспорт текстовых данных

Объёмные данные могут быть экспортированы в текстовый файл в нескольких различных форматах используя меню Объёмные данные → Экспортировать текст. Возможные форматы вывода включают в себя

Структурная сетка VTK Формат, предназначенный для загрузки напрямую в программное обеспечение, основанное на VTK, такое, как ParaView. Значения сохраняются как блок STRUCTURED_POINTS.

Один профиль вдоль Z на линию Каждая строка выходного файла состоит из одного профиля вдоль оси z. Файл содержит столько строк, сколько точек в каждой плоскости xy (изображении) объёмных данных. Профили упорядочены сначала по строке, потом по колонке (обычный порядок для пикселей в изображении).

Один слой XY на линию Каждая строка выходного файла состоит из одной плоскости xy изображения, сохранённой в порядке сначала по строке. потом по столбцу (обычный порядок пикселей в изображении). В файле будет столько строк, сколько уровней z в объёмных данных. Слои сохраняются в порядке увеличения z.

Матрицы, разделённые пустыми строками Каждая строка выходного файла состоит из одной строки изобраения в одной плоскости xy. После того, как вся плоскость сохранена, пустая строка отделяет следующую плоскость. Слои опять же сохраняются в порядке увеличения z.

Характеризовать профили

Основную характеризацию профилей вдоль оси z можно проводить используя меню Объёмные данные → Характеризоват профили. Эта функция формирует изображение, образуемое значениями статистических характеристик профилей взятых вдоль оси z. Набор доступных статистических величин такой же, как и в инструменте статистики строк/столбцов.

Двойной выбор изображение/график обычно работает очень похоже на меню извлечения изображений и профилей. Основное отличие состоит в том, что на графике можно выбрать диапазон, определяя часть стека изображений, для которой будут рассчитываться статистические характеристики. Этот интервал также можно задать численно используя элементы ввода Диапазон.

Изображение слева показывает рассчитанные характеристики и отображает потенциальный результат работы модуля. Выбор другой точки на изображении меняет профиль, показываемый в окне графика, что может оказаться полезно для выбора подходящего диапазона. Значение для выбранного профиля показывается под управляющим элементом выбора статистической величины. Выбор профиля, однако, никоим образом не влияет на результат работы модуля.

Характеризовать плоскости

Основную общую характеризацию плоскостей xy можно проводить используя меню Объёмные данные → Характеризоват плоскости. Эта функция формирует график, образованный значениями статистических характеристик отдельных плоскостей xy объёмных данных или их фрагментов. Набор доступных статистических величин является подмножеством тех, что доступны в инструменте расчёта статистических величин. Для некоторых величин может потребоваться какое-то время, чтобы рассчитать их для всех слоёв.

Двойной выбор изображение/график обычно работает очень похоже на меню извлечения изображений и профилей. Основное отличие состоит в том, что на плоскости изображения можно выбрать прямоугольную область, для которой будут рассчитываться статистические характеристики. Этот прмоугольник также можно задать численно используя элементы управления Начало и Размер.

График справа показывает рассчитанные характеристики и отображает потенциальный результат работы модуля. Выбор другой точки на графике меняет плоскость xy показываемую в окне изображения, что может быть полезно для выбора подходящей области. Значение для выбранной плоскости показывается под управляющим элементом выбора статистической величины. Однако, выбор плоскости никоим образом не влияет на результат работы модуля.

Арифметика

Арифметика на объёмных данных работает точно таким же образом, как арифметика для изображений, и использует тот же синтаксис выражений.

Изображение предпросмотра показывает усреднение по всем уровням, набор автоматически установленных переменных слегка отличается:

Переменная	Описание
d1, . . . , d8	Значение данных в вокселе. Значение показывается в базовых физических величинах, т.е. для тока в 15 нА, значение d1 будет 1.5e-8.
x	Горизонтальная координата вокселя (в физических величинах). Будет одинаковой для всех объёмных данных из-за требований совместимости.
y	Вертикальная координата вокселя (в физических величинах). Будет одинаковой для всех объёмных данных из-за требований совместимости.
z	Координата глубины (уровня) вокселя (в физических величинах). Будет одинаковой для всех объёмных данных из-за требований совместимости.
zcal	Координата калибровки z вокселя (в физических величинах) если объёмные данные содержат калибровку оси z (См. Калибровки оси Z).

Кластеризация K-средних и K-срединных

Техники сканирующей спектроскопии, такие как измерение кривых сила-расстояние в количественной нанометрологии (QNM), измерение вольтамперных характеристик в полупроводниковой промышленности, спектроскопия комбинационного рассеяния в характеризации новых материалов требуют снятия спектра в каждой точки сетки, наложенной на поверхность образца. Работа с полученным массивом данных является затруднительной, поскольку приходится работать и анализировать тысячи спектров. Если интересующий образец содержит ограниченный набор областей с очень похожими спектрами в каждой области, то техники, позволяющие группировать похожие спектры вместе, будут весьма полезны. Одним из подходов к решению подобной задачи является кластерный анализ. В программе Gwyddion на данный момент реализованы два метода: K-средних и K-срединных.

Оба алгоритма разработаны чтобы найти K кластеров с похожими друг на друга спектрами внутри кластера и максимально различными между кластерами. Таким образом, параметр количество кластеров определяет число кластеров K которое нужно получить в результате работы. Настройки знаков точности сходимости и макс. число шагов задают критерии сходимости алгоритма, который останавливается либо если достигнута заданная точность положения центров кластеров, либо превышено максимальное число итераций. Большая точность требует большего числа итераций, лимит на число циклов останавливает алгоритм, попавший в бесконечный цикл, если заданная точность не может быть достигнута.

Опция нормализовать это в некотором роде экспериментальная методика, которая приводит к более удачным результатам для данных сканирующей спектроскопии. Если интенсивность спектра не является важной и вы хотите группировать данные по похожести спектральных особенностей в средней частотной области (что является типичным, например, для спектроскопии комбинационного рассеяния), то включите этот флажок. Эта опция убирает низкочастотный фон спектра путём вычитания минимального значения в скользящем окне, и затем нормализует спектр, делая среднюю интенсивность равной 1.0. Оба модуля выводят два поля данных: одно показывает к какому кластеру принадлежит каждый спектр в точке и второй показывает ошибку — разницу между текущим спектром и центром кластера, к которому он принадлежит. Если включена нормализация, то третье выводимое поле данных показывает значения, на которые делились интенсивности спектральных линий (после вычета низкочастотного фона). Также выводится график со спектрами, соответствующими центрам кластеров.

Алгоритмы, лежащие в основе этих двух модулей основаны на кластеризации методами машинного обучения: соответственно, K-средних и K-срединных. Мы считаем каждый спектр (график, извлекаемый из объёмных данных вдоль оси z) точкой в многомерном пространстве, размерность которого соответствует числу точек в графике. расстояние между парой точек определяется как квадратный корень из суммы квадратов разностей координат в каждой спектральной точке-измерении (L^2-норма). Оба алгоритма инициализируются случайным выбором K точек из имеющегося набора спектров в качестве центров кластеров. Затем применяется обычный двухстадийный алгоритм: мы распределяем каждую точку по кластерам таким образом, чтобы она принадлежала к кластеру, центр которого будет ближе всего к ней, и затем перемещаем центры кластеров. Разница двух аллгоритмов состоит в том, как рассчитать новые положения центров кластеров: они будут средним значением координат точек, принадлежащих кластеру, для K-средник и срединным вдоль каждого направления в многомерном пространстве для K-срединных. Результаты последней итерации возвращаются в основную программу в формате, описанном выше.

Удалить выпадающие для модуля K-средних изменяет алгоритм расчёта центров кластеров таким образом, чтобы использовать точки, лежащие не дальше значения Порога выпадающего умноженного на среднеквадратичное отклонение данных σ внутри каждого кластера. Эта опция удаляет отдельные выпадающие дефективные точки (выбросы, космические лучи на изображениях микроскопии комбинационного рассеяния и т.д.) из расчёта, делая центры кластеров несколько более чистыми и раздельными. Также эта опция может перемещать границу между близко расположенными кластерами к более корректному положению между двумя центрами максимальной плотности точек, не испорченному выпадающими далёкими от центра точками.

Магнитно-силовая микроскопия

Некоторые из функций работы с объёмными данными предназначены для обработки данных МСМ. Они обычно в целом аналогичны их эквивалентам для изображений.

Преобразование данных МСМ в градиент силы полностью одинаково для объёмных данных и изображений. Следовательно, общие сведения о преобразовании данных МСМ для изображений применимо без изменений и для объёмных данных.

Оценка передаточной функции Объёмные данные → Оценка передаточной функции также достаточно похоже на оценку передаточной функции для изображений. Передаточная функция оценивается для каждого уровня объёмных данных и её различные значения строятся в виде графиков. Какие из графиков будут отображаться выбирается на вкладке Параметры вывода. Параметр регуляризации σ может быть одинаковым для всех уровней или он можем оцениваться отдельно для каждого путём выбора опции Оценивать параметр регуляризации для каждого уровня. расчёт в этом случае будет идти заметно дольше. Для метода Наименьших квадратов даже размер передаточной функции может быть оценен отдельно для каждого уровня если включено Оценивать размер для каждого уровня. Размер, заданный в диалоговом окне приме этом определяет размер вывода - и, следовательно, максимальный возможный размер. Более маленькие передаточные функции при этом дополняются нулями до заданного размера.

Проверка соответствия поля утечки Объёмные данные → Соответствие поля утечки пересчитывает поле для разных высот аналогично Сдвигу поля МСМ. Однако, поскольку объёмные данные содержат изображения, соответствующие многим различным уровням, возможно рассчитать поле для каждого и сравнить с рассчитанным полем. Это данный модуль и делает.

4.24 Обработка объёмных данных: Стеки изображений

Объёмные данные также можно использовать для представления стеков изображений, например, тех, которые получаются в ходе измерений с помощью высокоскоростной сканирующей зондовой микроскопией, представляющих несколько измерений одного образца, либо одной и той же области, либо при латеральном смещении. В этом случае данные необходимо загрузить как стек изображений вдоль оси z. Подобные данные можно обрабатывать с помощью специальных функций из меню Объёмные данные окна инструментов, в основном описанных в этой части руководства пользователя. Помимо этого, также можно использовать общие функции для обработки объёмных данных.

Выравнивание плоскостей XY

Несколько простых исправлений и настроек могут быть автоматически применены к каждой плоскости xy объёмных данных.

Объёмные данные → Исправить данные → Выровнять плоскость XY применяет выравнивание плоскости к каждой плоскости. Другими словами, оно вычитает среднюю плоскость из всех изображений, сформированных плоскостями xy. Каждая плоскость обрабатывается отдельно.

Объёмные данные → Исправить данные → Выровнять среднюю плоскость XY применяет выравнивание плоскости используя одну и ту же плоскость, среднюю, к каждой плоскости в стеке изображений. Оно рассчитывает одну среднюю плоскость для всех изображений, сформированных плоскостями xy, и вычитает эту среднюю плоскость из всех изображений.

Объёмные данные → Исправить данные → Выравнивание граней XY применяет выравнивание граней к каждому изображению, сформированному плоскостями xy. См. описание алгоритма Выравнивания граней для дополнительной информации. Каждая плоскость обрабатывается отдельно.

Объёмные данные → Исправить данные → Выровнять основание XY применяет алгоритм выравнивания основания к каждому изображению, сформированному плоскостями xy. См. описание алгоритма Выравнивания

основания для дополнительной информации. Каждая плоскость обрабатывается отдельно.

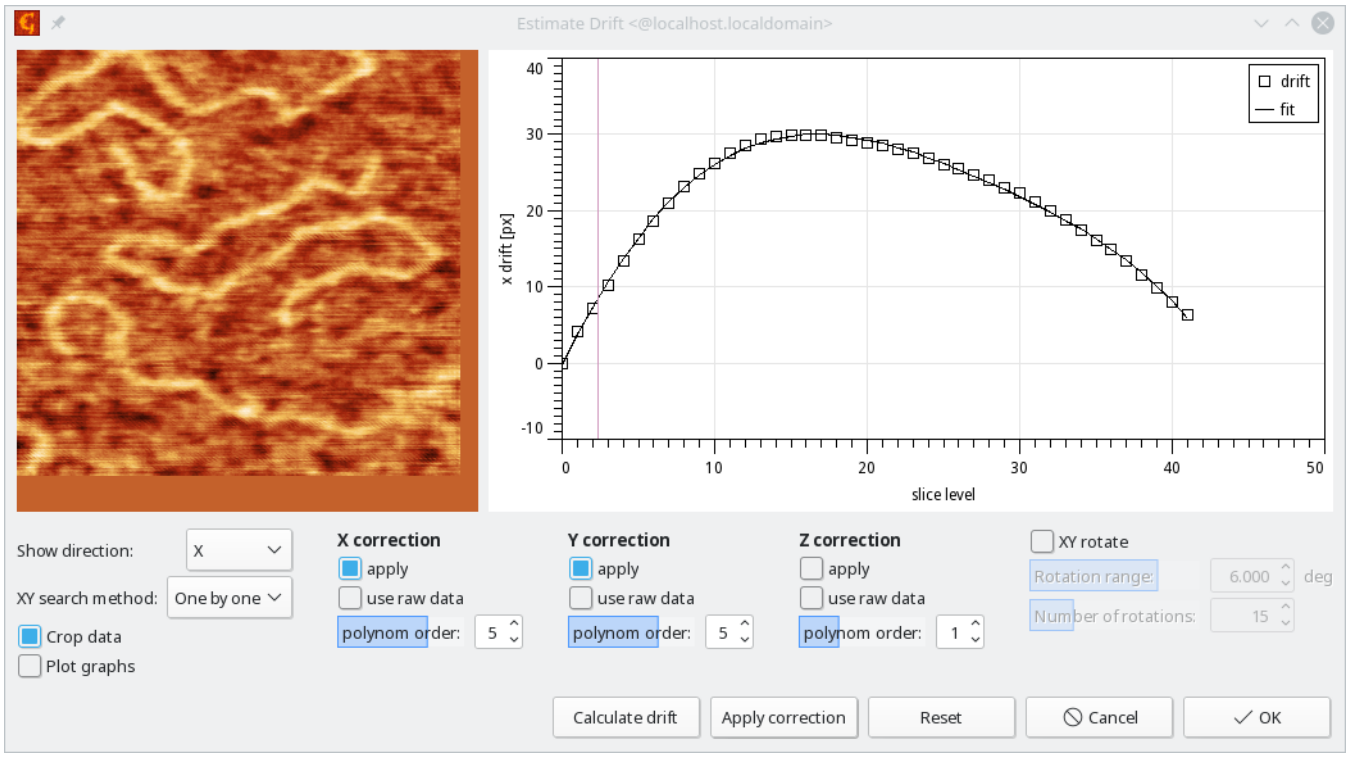
Объёмные данные → Исправить данные → Линейная коррекция ступеней применяет алгоритм линейной коррекции ступеней к каждому изображению, сформированному плоскостями *xy*. См. описание алгоритма модуля Линейной коррекции ступеней для изображений. для дополнительной информации. Каждая плоскость обрабатывается отдельно.

Объёмные данные → Исправить данные → Выпадающие плоскости XY заменяет выпадающие значения на каждом изображении, сформированном плоскостями *xy* средним значением для данной плоскости. Выпадающие здесь определяются как значения, лежащие дальше трёх стандартных отклонений от среднего.

Объёмные данные → Исправить данные → Одномерная фильтрация БПФ применяет алгоритм одномерной фильтрации с помощью БПФ к каждому изображению, сформированному плоскостями *xy*. Спектр мощности, показываемый на графике, может быть рассчитан для каждой плоскости отдельно или может усредняться со всех плоскостей. Изменяя уровень, демонстрируемый в окне предпросмотра, можно просмотреть все плоскости и проверить влияние фильтрации на каждую из них. Выделение мышью в окне графика и методы подавления имеют ту же логику работы, что и модуль одномерной фильтрации БПФ для изображений.

Объёмные данные → Исправить данные → Убрать царапины применяет алгоритм обнаружения и удаления царапин (ошибки цепи обратной связи в быстрой оси сканирования) к каждому изображению, сформированному плоскостями *xy*. Каждая плоскость обрабатывается отдельно и уровень z предпросмотра может использоваться для проверки каждой из них. Метод обнаружения царапин тот же, что используется в модуле удаления царапин для изображений.

Объёмные данные → Исправить данные → Оценить дрейф обнаруживает и удаляет дрейф для каждой плоскости *xy*. Дрейф обнаруживается кросс-корреляцией, которую можно применить или для соседних плоскостей, одна за одной, что будет оптимальным для больших значений дрейфа, наблюдаемых в ходе получения стека изображений, или в качестве опорного изображения может использоваться средняя плоскость, что оптимально для малых значений дрейфа или шумных данных. Уровень z предпросмотра может использоваться для работы с каждой из плоскостей, включая визуализацию обрезанных данных после применения коррекции дрейфа. Помимо оценки дрейфа XYZ, изображения также можно поворачивать в заданном диапазоне в поисках угла поворота, который дает наилучшую оценку корреляции.



Диалоговое окно оценки дрейфа показывающее обнаруженный дрейф и обрезанные данные.

Методы суперразрешения

Если измерено несколько изображений одного и того же участка поверхности и стек изображений сохранен как объёмные данные, их можно использовать для расчёта изображения со сверхразрешением, например, используя некоторую гипотезу о статистических параметрах образца.

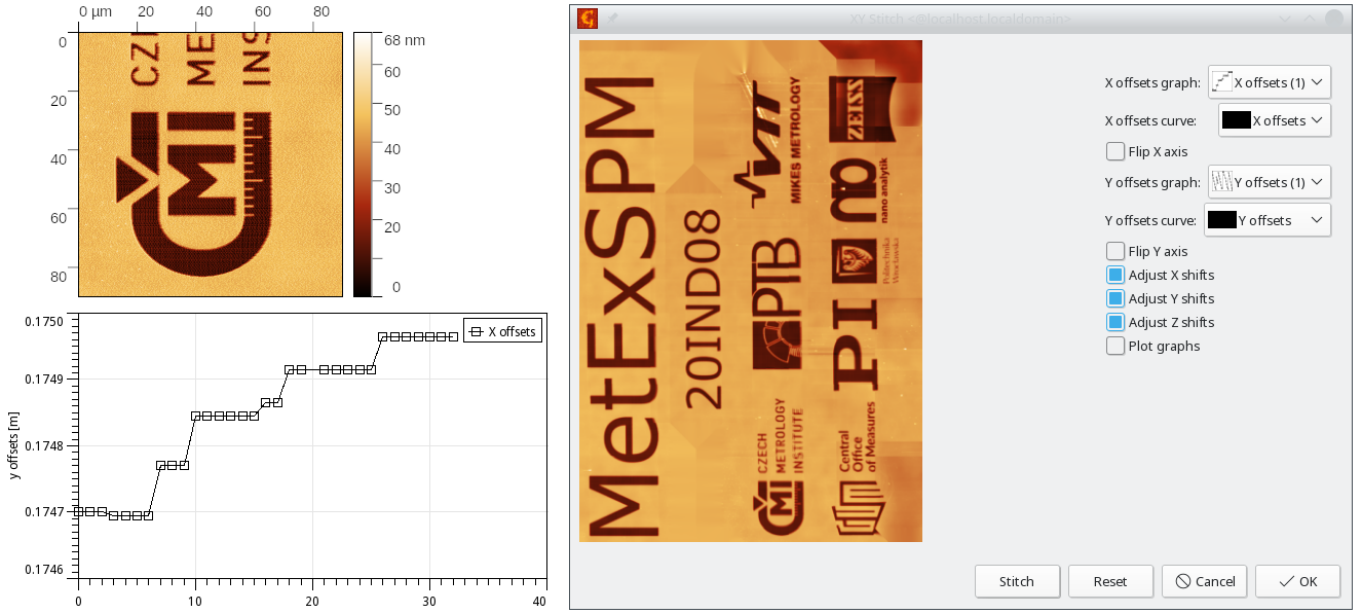
Объёмные данные → Исправить данные → Объединение с локализацией применяет алгоритм локализации [1]. На каждой плоскости *xy* обнаруживаются локальные пики, вероятность обнаружения выражается и суммируется по всем плоскостям. Метод лучше всего работает на биомолекулах или подобных объектах, состоящих из разрешимых пиков, лежащих на плоской поверхности, и может устранить влияние свертки с зондом и сгенерировать изображение с высоким разрешением на основе серии изображений с низким разрешением. Важным предположением является то, что наконечник зонда касается немного разных частей объекта при каждом сканировании, что делает этот метод хорошо подходящим для мягких образцов в жидкой среде. Обратите внимание, что отдельные плоскости должны быть выровнены для отображения одной и той же области поверхности, для этого, например, можно использовать модуль Оценки дрейфа.

Один высокоскоростной кадр АСМ и результат алгоритма локализационной микроскопии, данные любезно предоставлены Джорджем Р. Хитом и Саймоном Шойрингом (George R. Heath and Simon Scheuring).

Сшивание

Когда стек изображений представляет разные области на поверхности, можно создать объединенные данные, представляющие более крупную область поверхности. Для этого можно использовать информацию, получаемую из движения грубой подвижки образца или из обнаруженных пересечений изображений.

Объёмные данные → Исправить данные → Сшивание XY проводит сшивание набора изображений, представленных в форме объёмных данных, используя пересечения для минимизации взаимных смещений и используя графики сдвигов по X и Y между изображениями. Смещения по X и Y представлены в базовых единицах измерения (т.е. обычно в метрах) и их ось X интерпретируется как номер кадра.



Образец сшивки объёмных данных, показывающий одно из 32 изображений, полученных с тестового образца проекта MetExSPM (изготовленного PTB), данные грубой подвижки в оси X и предпросмотр сшитых данных в графическом интерфейсе данного модуля.

Источники

[1] G.R Heath, E. Kots, J.L. Robertson, et al.: Localization atomic force microscopy. Nature 594 (2021) 385–390, 10.1038/s41586-021-03551-x

4.25 Обработка данных XYZ

Возможности обработки данных XYZ на данный момент достаточно ограничены. Большая часть анализа должна производиться после преобразования их в изображение — основной тип данных, для которого Gwyddion предлагает большой выбор функций их обработки.

Основные операции с данными XYZ в настоящий момент включают в себя объединение двух наборов точек, доступное в меню Данные XYZ → Объединить. Объединение позволяет избежать создания точек с в точности совпадающими пространственными координатами. Вместо этого их значения усредняются – что включается опцией Усреднить совпавшие точки.

Растеризация

Данные XYZ → Растеризовать

Gwyddion отлично работает с данными, снятыми на правильной сетке, т.е. данными изображения. Чтобы применить его функции обработки данных к нерегулярным данным XYZ, эти данные необходимо интерполировать на правильную сетку. Другими словами, данные нужно растеризовать.

Пользователю доступен выбор нескольких методов интерполяции, задаваемых опцией Тип интерполяции:

Округление Этот вариант интерполяции аналогичен интерполяции округлением для правильных сеток. Интерполированное значение в точке на плоскости равно значению ближайшей точки в наборе точек XYZ. Это означает. что проводится триангуляция Вороного и каждая ячейка Вороного «заполняется» значением ближайшей точки.

Линейная Этот вид интерполяции аналогичен линейной интерполяции для правильных сеток. Интерполированное значение в точке рассчитывается из значений трёх вершин треугольника триангуляции Делоне, содержащего точку. Поскольку три вершины определяют плоскость в пространстве уникальным образом, значение в точке определяется этой плоскостью.

Поле Значение в точке будет взвешенным средним всего набора точек XYZ, где вес обратно пропорционален четвёртой степени расстояния. Поскольку для каждой интерполированной точки рассматриваются все точки данных XYZ, этот метод может оказаться очень медленным.

Среднее Метод получения значений пикселей на лету используя комбинацию простого округления и переноса соседних значений. В плотных местах, где большое количество точек XYZ попадает в каждый пиксель, значение, присваиваемое пикселю будет некоторым вариантом взвешенного среднего точек. В местах с редким расположением точек, где относительно большие области не содержат точек XYZ, значение пикселя переносится с соседних пикселей, которые содержат точки XYZ. Основной особенностью данного метода интерполяции является то, что он всегда будет быстрым, в то же время нередко получается весьма неплохой результат интерполяции.

Первые два типа интерполяции основаны на тесселяции Вороного и триангуляции Делоне, которые плохо определены для наборов точек, где более двух точек лежит на одной линии и более трёх лежит на окружности. если это происходит, триангуляция может дать сбой и будет показано сообщение об ошибке.

Значения вне выпуклой оболочки множества точек XYZ на плоскости описываются опцией Тип внешней части:

Граничный Набор точек не меняется никоим образом и значения на выпуклой оболочке просто расширяются на бесконечность.

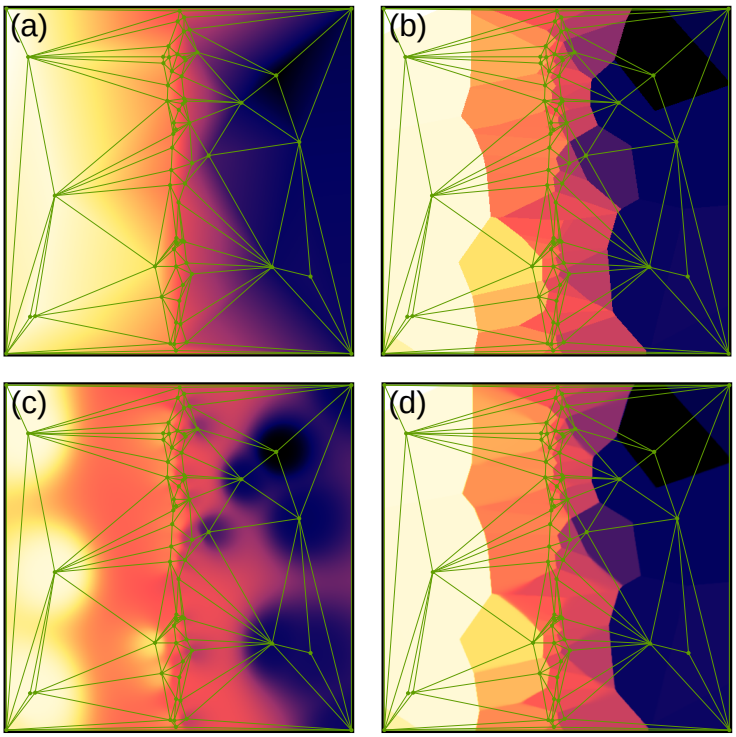
Зеркальный Набор точек дополняется точками, «отраженными» относительно сторон ограничивающего параллелепипеда.

Периодический Набор точек дополняется периодически повторяющимися точками из окрестности противоположной стороны ограничивающего параллелепипеда.

Горизонтальные и вертикальные размеры в пикселях для результирующего изображения задаются как Горизонтальный размер и Вертикальный размер в разделе Разрешение.

Нередко результирующее изображение должно иметь квадратные пиксели. Это может быть достигнуто нажатием кнопки Сделать пиксели квадратными. Данная функция не пытается сделать пиксели квадратными в процессе редактирования разрешения и диапазонов размеров чтобы не менять значения, которые вы хотели бы сохранить. Поэтому перевод в квадратные пиксели надо включить в явном виде этой кнопкой.

Возможно растеризовать только часть данных XYZ и также построить часть их окружения. Область для растеризации изображения управляется диапазонами, задаваемыми в разделе Физические размеры диалогового окна. Кнопка Сбросить диапазоны устанавливает область в прямоугольник, целиком содержащий данные XYZ. Также можно выбрать область для построения на изображении предпросмотра, естественно предполагая, что она лежит внутри показываемой сейчас на экране области.



Триангуляция Делоне показанная в режиме (a) линейной интерполяции, (b) интерполяции округлением, (c) интерполяцией по всему полю и усреднением (d) для неправильного набора точек. Поскольку точки расположены достаточно редко, усреднение похоже на округление, только чуть размытое.

Если данные XYZ представляют собой изображение, т.е. точки формируют регулярную сетку, ориентированную вдоль осей декартовой системы координат, и каждая точка в прямоугольной области представлена только один раз, функция растеризации может сразу построить соответствующее изображение. Это можно сделать используя кнопку Создать изображение сразу которая появляется вверху диалогового окна в данном случае.

Выравнивание

Данные XYZ → Исправить нуль

Данные XYZ → Выровнять плоскость

Основная функция Исправить нуль является той же самой, что и Исправить нуль для данных изображения. Она смещает все значения таким образом, чтобы их минимум стал равен нулю.

Выровнять плоскость удаляет среднюю плоскость изображения. Эта функция предлагает два подхода. Вычитание полностью эквивалентно вычитанию плоскостидля изображений и представляет собой простое вычитание средней плоскости, которая определяется с помощью обычного метода наименьших квадратов.

Поворот удаляет среднюю плоскость реальным вращением облака точек, операцией которая может быть точно реализована только для данных XYZ (соответствующая функция Выровнять поворотом для изображений является приближенной). Более того, функция гарантирует что средняя плоскость будет горизонтальной после поворота, что соответствует удалению средней плоскости методом наименьших квадратов расстояний до этой плоскости (в отличие от вертикальных расстояний для изображений). Естественно, поскольку поворот смешивает пространственные координаты и значения данных, он будет возможен только если z является той же самой физической величиной, что и x, и y (предполагается, что геометрическими размерами).

Вращение меняет координаты x и y точек, потенциально делая данные XYZ несовместимыми с другими данными в файле. Включая Обновить X и Y всех совместимых данных можно обновить пространственные координаты во всех остальных наборах данных XYZ в файле, чтобы они соответствовали пространственным координатам в текущем после поворота. Значения z во всех остальных данных естественно остаются неизменными.

Аппроксимировать форму

Данные XYZ → Аппроксимировать форму

Эта функция также доступна для изображений. Описание различий между вариантами функции для изображений и данных XYZ можно найти в разделе Аппроксимировать форму для изображений.

Аппроксимация методом наименьших квадратов геометрическими фигурами и другими предопределёнными функциями всего набора данных может использоваться различными способами: для удаления общей формы, такой как сферическая, измерения геометрических параметров или создания идеализированных данных, соответствующих несовершенной реальной топографии. Также возможно использовать данный модуль для генерации искусственных данных если ничего не аппроксимировать и задать все геометрические параметры явным образом, хотя это всё равно требует обеспечить входные данные, которые будут задавать координаты XY точек.

Простейший вариант использования требует выбрать тип формы для аппроксимации, задаваемый как Тип функции, и нажать следующие три кнопки в заданном порядке:

Оценка Автоматическая начальная оценка параметров. Обычно первоначальной оценки достаточно чтобы перейти к аппроксимации. Если она слишком отличается от правильной может понадобиться подстроить некоторые из параметров вручную чтобы помочь аппроксимации методом наименьших квадратов найти правильный минимум. Для некоторых функций оценка использует случайную выборку из входных данных чтобы не занимать слишком много времени. Вследствие этого она является невоспроизводимой и нажатие этой кнопки снова может привести к несколько другой начальной оценке параметров.

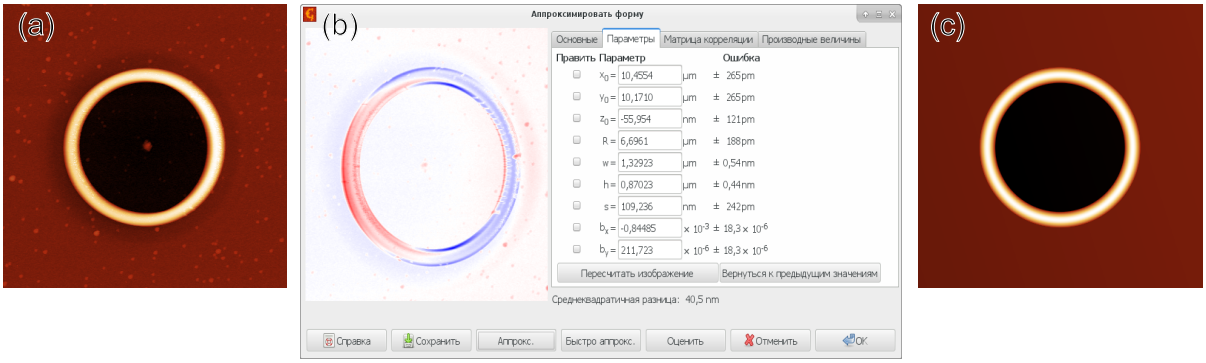
Быстрая аппроксимация Аппроксимация методом наименьших квадратов используя случайную выборку входных данных. Для большого набора входных данных работает гораздо быстрее, чем полная аппроксимация, при этом в большинстве случаев она сходится к набору параметров, достаточно близких к конечным. Позволяет быстро проверить будет ли метод наименьших квадратов сходиться к ожидаемому минимуму — и одновременно получить начальный набор параметров ближе к минимуму для последующей полной аппроксимации.

Аппроксимация Полная аппроксимация методом наименьших квадратов используя полный набор данных. Может занять некоторое время, особенно для больших наборов входных данных и медленно вычисляемых функций.

Остаточная разница на одну точку в методе наименьших квадратов показана под вкладками как Среднеквадратичная разница. Она рассчитывается заново при каждом перерасчёте предпросмотра, т.е. не только после аппроксимации, но и после оценки и после подстройки параметров вручную.

Основные элементы управления на первой вкладке также позволяют выбрать, что будет выводиться в результате аппроксимации: либо аппроксимированная форма, либо разница между исходными данными и ней, либо оба.

Изображение предпросмотра может показывать либо входные данные, либо аппроксимирующую форму, либо разницу между ними двумя — что обычно оказывается наиболее полезным вариантом. Разница может быть показана с адаптированной шкалой цвета, где красный обозначает входные данные выше аппроксимирующей формы, синие ниже аппроксимации. Этот режим включается опцией Показывать различия с адаптированной шкалой цвета.



Пример аппроксимации формы: a) оригинальные данные топографии с кольцевой структурой на поверхности тонкой плёнки, b) диалоговое окно аппроксимации с параметрами справа и разницей между данными и аппроксимацией, показанной в левой части окна, c) результирующая аппроксимирующая форма.

Вкладка Параметры показывает значения всех параметров аппроксимации и их ошибок и позволяет осуществлять точный контроль за ними. Каждый параметр может быть свободным или зафиксированным. Зафиксированные параметры не меняются никакими аппроксимирующими и оценивающими функциями, они сохраняют то

значение, которое вы ввели. Когда вы меняете значение параметра вручную, изображение предпросмотра не перерасчитывается заново — необходимо нажать Пересчитать изображение чтобы обновить его. Кнопка Вернуться к предыдущим значениям позволяет вернуться к предыдущему набору параметров. Для оценки, аппроксимации или изменения вручную это означает набор значений параметров до того, как выполняемая операция их изменила. Для возврата к предыдущим это означает набор параметров до возврата — поэтому повторные нажатия на эту кнопку будут менять параметры между двумя последними наборами.

Вкладка Матрица корреляции показывает после успешной аппроксимации матрицу корреляции параметров. Коэффициенты корреляции, которые очень близки к единице (по модулю) будут подсвечены.

И наконец, вкладка Производные величины показывает различные полезные значения, рассчитанные из параметров аппроксимации. Некоторые функции не содержат производных величин, некоторые имеют несколько таких. Большая часть производных величин представляет собой параметры, которые могут оказаться более интересны для вас, чем действительные параметры аппроксимации, но плохо подходят для аппроксимации вследствие проблем с устойчивостью численного решения. Производные величины показываются с оценкой ошибок, рассчитанной используя законы распространения ошибок (включая корреляции параметров).

Типичным примером является кривизна сферической поверхности против её радиуса кривизны. В то время, как радиус является более привычным, он меняется от бесконечности до минус бесконечности когда поверхность меняется между выпуклой и вогнутой (т.е. когда становится очень близкой к плоской), что делает его неподходящим в качестве параметра аппроксимации. Кривизна, напротив, является нулевой для плоской поверхности. Следовательно, кривизна используется как параметр аппроксимации и радиус кривизны показывается как производная величина.

4.26 Обработка данных карт кривых

Карты кривых формируются наборами кривых, измеренных в узлах правильной сетки, таким образом, задачи обработки данных связаны либо с извлечением данных отдельной кривой, либо с автоматической обработкой кривых в каждой точке для создания карты некоторой рассчитанной величины.

Основные операции с картами кривых включают в себя простые задачи, доступные как набор пунктов меню Карты кривых → Базовые действия. Они включают в себя операции по обрезке, перевороту и повороту карты кривых, а также изменения их масштаба в физических единицах измерения, которые используются подобно своим эквивалентам для двумерных данных. Такие функции полезны для любого типа карт кривых. В противоположность этому, ряд функций подходят только для определенных типов карт кривых, а именно массивов кривых сила-расстояние, которые могут генерировать многие виды СЗМ.

Следует отметить, что в настоящее время функции работы с картами кривых обычно не сохраняют данные для отката операций поскольку типичная карта кривых и так очень большая.

Обрезка

Карты кривых → Основные операции → Кадрировать

Модуль обрезает карту кривых в пространственных направлениях, размеры могут быть заданы как в пикселях, так и в физических размерах. С включенной опцией Сохранять пространственные смещения, координаты верхнего левого угла полученного в результате изображения будут соответствовать координатам верхнего левого угла выделенной области, в противном случае координаты верхнего левого угла буду установлены в (0,0).

Перевернуть

Можно перевернуть массив данных горизонтально (т.е. относительно вертикальной оси), вертикально (т.е. относительно горизонтальной оси) или в обоих направлениях с помощью Карты кривых → Базовые действия → Отразить горизонтально, Отразить вертикально или Перевернуть обе оси, соответственно.

Поворот на угол, кратный 90°

Поворот данных на угол, кратный прямому, выполняется с помощью одной из основных функций поворота: Карты кривых → Базовые действия → Повернуть по часовой, Повернуть против часовой .

Размеры и единицы измерения

Карты кривых → Основные операции → Размеры и единицы измерения

Этот модуль изменяет физические размеры карт кривых. Это полезно чтобы исправить сырые данные, которые были импортированы с неправильными физическими размерами или в качестве простой ручной перекалибровки размеров и единиц измерения. Помимо различных методов для определения множителей масштабирования (соответствия размеру пикселя другого набора данных, задания масштаба напрямую или задания физических размеров), модуль также можно использовать для задания пространственных смещений. Наконец, он также может использоваться для задания единиц измерения пространственных смещений если это не было сделано в ходе загрузки файла.

Удалить сегменты

Карты кривых → Основные операции → Удалить сегменты

Этот модуль убирает любое разделение карты кривых на сегменты. Сегменты формируются разметкой набора данных в каждом пикселе карты кривых и могут использоваться, например, для разделения кривой сила-расстояние на участки, соответствующие подводу и отводу для модулей обработки силовых кривых. Используя данный модуль все эти отметки можно удалить.

Выровнять

Карты кривых → Выровнять...

Этот модуль выполняет выравнивание кривых вдоль оси Z, где Z может обозначать высоту, а также любую другую переменную, от которой зависят спектры, например, напряжение в вольтамперных характеристиках. Типовое использование этой функции это выравнивание кривых сила-расстояние снятых на образце с большим изменением высоты, для сдвигания всех кривых после получения топографии таким образом, чтобы они начинались на одном уровне Z.

Извлечь кривые

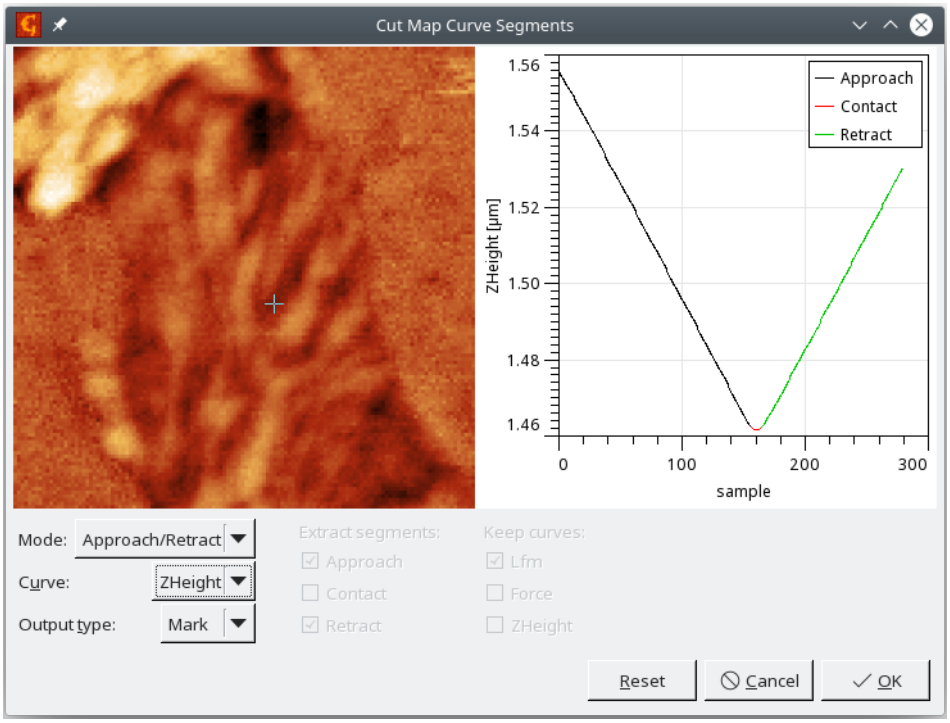
Карты кривых → Извлечь кривые

Этот модуль извлекает отдельные кривые в виде графика, который будет показан в окне графика. Поскольку в данных, формирующих карту кривых отсутствует иерархическое упорядочивание, необходимо выбрать Абсциссу (независимую переменную) и Ординату (зависимую переменную) чтобы так сделать. Обычно для кривых сила-расстояние Абсциссой будет некоторая величина относящаяся к высоте или расстоянию от зонда до поверхности, а Ординатой некая величина, связанная с силой. Можно одновременно извлекать много кривых включением опции Извлечь несколько

Разделить на сегменты

Карты кривых → Разделить на сегменты

Этот модуль можно использовать либо для создания сегментов на карте кривых, либо для извлечения этих сегментов. Сегменты являются ключевым предусловием для некоторых функций анализа карт кривых. Например, они могут представлять участки кривых сила-расстояние, соответствующие области подвода к образцу и отвода зонда от него. Модуль использует Кривую выбранную пользователем и применяет некоторый метод (выбранный параметром Режим) для того, чтобы разделить (или разметить) данные. Для вышеупомянутого случая измерений силовых кривых наиболее логичным разбиением будет основанное на высоте. Здесь показано сегментирование кривой на участки соответствующие подводу, удержанию и отводу.



Снимок экрана модуля разделения на сегменты, показывающий типовые настройки сегментации для данных в формате сила-расстояние.

Тип вывода может быть задан чтобы только размечать сегменты, что чаще всего и требуется от данного модуля. В этом случае какрта кривых не меняется, только добавляются положения сегментов для каждого индивидуального пикселя. Этот режим следует выбирать для подготовки данных перед работой модулей обработки карт кривых, которые используют данные, разделенные на сегменты. Второй вариант это извлечь определенные сегменты, включая выбор того, какие кривые необходимо оставить. Это также можно использовать если необходимо значительно уменьшить размер данных, сохранияя только необходимую их часть.

4.27 Карты кривых сила-расстояние

Важный тип карт кривых основан на данных в формате сила-расстояние, снятых в узлах правильной сетки. Все основные производители СЗМ предлагают какой-то из режимов для получения подобных данных, в то время как основной целью является картирование механических свойств образца. В Gwyddion этот тип данных может быть представлен как карты кривых.

В этом разделе мы описываем модули, которые можно использовать для работы с картами кривых сила-расстояния, а также даём пример последовательности действий, которые приводят к получению количественных результатов по наномеханическим свойствам образца на основе измеренных данных.

Следует отметить, что для большей части обсуждаемых модулей важно использовать карты кривых которые уже сегментированы. Это означает, что выделены участки подвода и отвода на кривых, либо уже приходя размеченными с прибора, либо будучи размеченными в Gwyddion используя модуль сегментации. Следует также отметить, что модуль предполагает что зависимая переменная это расстояние от зонда до поверхности - и она будет отрицательной для части кривой, соответствующей индентации образца и положительной в той части кривой, где зонд не касается образца, как показано на снимках экрана в данном разделе.

Убрать полиномиальный фон

Карты кривых → Убрать полиномиальный фон

Этот модуль аппроксимирует заданную часть кривой сила-расстояние полиномом определенной Степени и затем вычитает его из всей кривой. Это делается для каждого пикселя и может использоваться для удаления некоторого нежелательного фона из нулевой линии (части данных, где зонд находится далеко от поверхности). Параметры Абсцисса и Ордината используются чтобы задать зависимую и независимую переменные, которые будут обычно в какой-то степени зависеть от расстояния между зондом и поверхностью для Абсциссы и

в какой-то мере зависеть от силы для Ординаты. Аппроксимация может быть ограничена определенным заданным Сегментом. Диапазон аппроксимации задаётся в процентах, таким образом, он пересчитывается для каждого пикселя исходя из длины кривой, независимо от абсолютного смещения кривых.

Удалить синусоидальный фон

Карты кривых → Удалить синусоидальный фон

Модуль аппроксимирует заданную часть кривой сила-расстояние синусоидальной функцией и затем вычитает её из всей кривой. Это делается для каждого пикселя и может использоваться для удаления нежелательного фона относящегося к влиянию интереференции с нулевой линии (которая представляет собой часть данных где зонд находится далеко от поверхности). Параметры Абсцисса и Ордината используются чтобы задать зависимую и независимую переменные, которые будут обычно в какой-то степени зависеть от расстояния между зондом и поверхностью для guimenu>Абсциссы

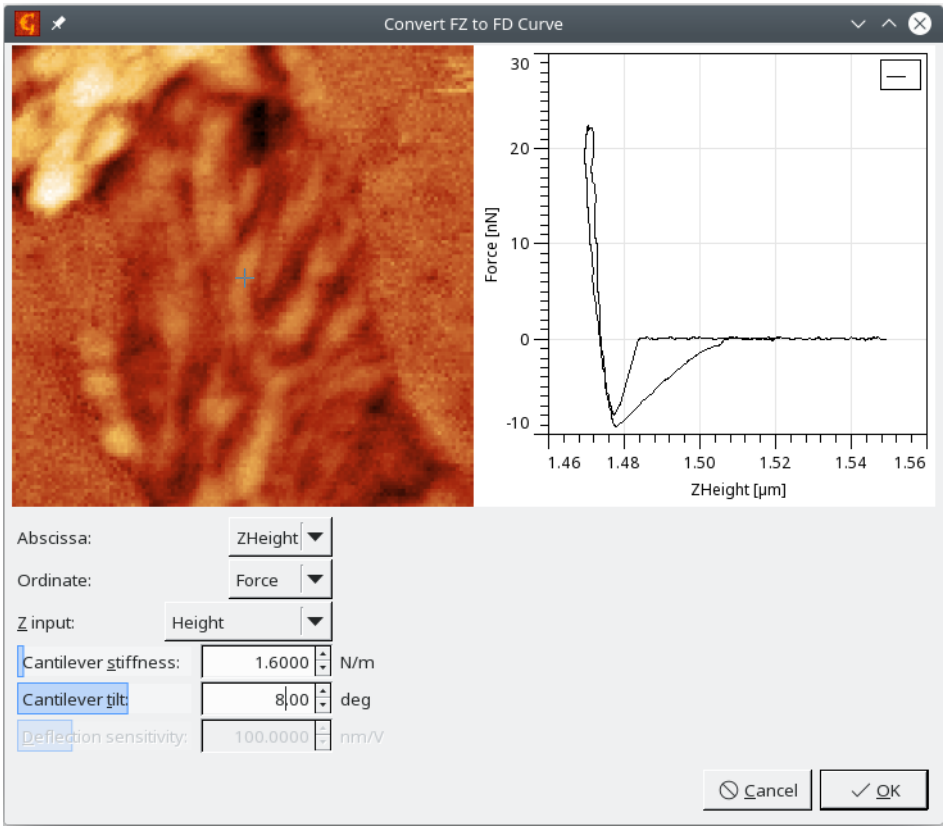
Конвертировать кривую FZ в FD

Карты кривых → Конвертировать кривую FZ в FD

Модуль выполняет преобразование независимой переменной на кривых сила-расстояние от величин, отнносящихся к Z-пьезо (обычно в ПО микроскопов она называется z-pieso, height, высота, и т.п.) к расстоянию между зондом и образцом, здесь и далее эта величина будет называться расстояние. Это учитывает влияние ограниченной жесткости кантелевера, который отклоняется в ходе снятия данных в формате сила-расстояния. Вот почему модуль требует ввести Жесткость кантелевера. Это значение иногда можно найти в метаданных, а иногда можно получить из другого эксперимента. Чем ниже жесткость кантелевера, тем больше её влияние на кривую. Очень низкое значение может даже так изменить наклон кривой, что он станет нереалистичным.

Данные, получаемые с различных приборов, могут использовать разные варианты ориентации оси Z и опция Входная Z может использоваться, чтобы это отразить. Задача состоит в том, чтобы сориентировать силовую кривую таким образом, что максимум силы будет расположен слева, т.е. ось X графика будет расстоянием между зондом и образцом, которое будет отрицательным когда зонд вдавлен в образец.

Эффект от повышения жесткости кантелевера, связанный с углом между балкой кантелевера и плоскостью поверхности образца может быть добавлен в модель используя параметр наклон кантелевера. Если единицы данных для силы представлены как Вольты, параметр Чувствительность детекции автоматически активируется может использоваться для конвертации данных в значения силы.



Снимок экрана модуля конверсии из FZ в FD.

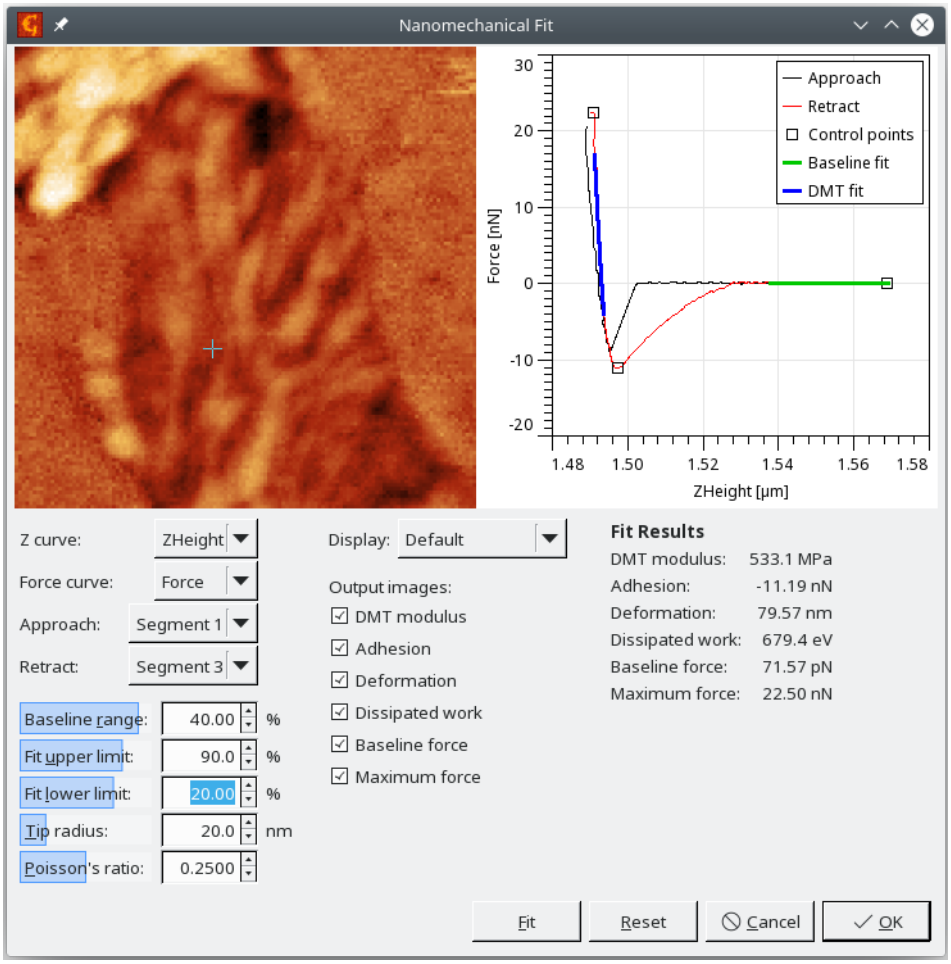
Наномеханическая аппроксимация

Карты кривых → Наномеханическая аппроксимация

Этот модуль производит автоматический расчёт простых механических свойств из карт кривых сила-расстояние. Пользователь может ввести диапазоны, на которых будут рассчитываться базовая линия (линия нуля или нулевая линия) и часть, соответствующая отводу, а также от него потребуется ввести Радиус зонда и Соотношение Пуассона. Правильные кривые должны быть выбраны из набора данных в каждой точке, также требуется выбрать правильные сегменты. Эти настройки, однако, запоминаются, таким образом, если обрабатываются однотипные данные, нет нужды вводить эти параметры каждый раз.

Адгезия рассчитывается как сила между минимальным значением на кривой отвода и средним значением на выбранной части базовой линии. Деформация соответствует длине части, соответствующей отталкиванию, на кривой подвода, т.е. она является расстоянием между положением, в котором сила стала равна нулю после того, как произошел перескок в режим контакта и положением максимальной силы. Абсолютная величина DMT (модуля Юнга в модели Derjaguin-Muller-Toporov) определяется аппроксимацией выбранной части кривой отталкивания. Работа сил рассеяния рассчитывается как разница между интегралами под кривой подвода и отвода.

Можно выбрать какие из этих значений будут выводится в виде массивов и дать модулю рассчитать значения в каждом пикселе используя кнопку Аппроксимировать.



Снимок экрана модуля аппроксимации наномеханики.

В конце будет получен набор полей данных, соответствующих пространственным распределениям результатов по поверхности.

Пример последовательности действий по анализу кривой сила-расстояние

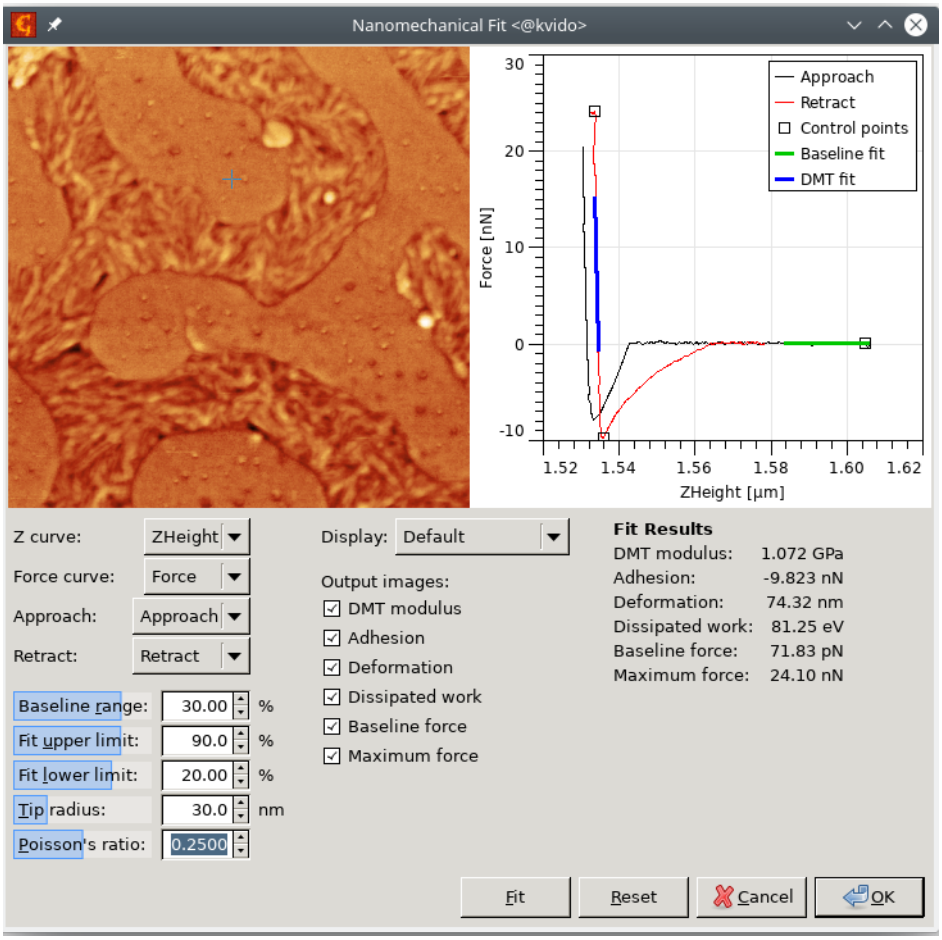
Для того, чтобы проиллюстрировать всю процедуру получения результатов расчёта наномеханики из карт кривых сила-расстояние мы покажем в деталях пример того, как можно комбинировать различные модули.

Данные, используемые в данном примере были получены на системе Park Systems в режиме PinPoint, используя кантелевер SD-R30-FM. Образец сформирован двумя смешанными полимерами. Входной файл доступен для скачивания. Поскольку карты кривых всегда налагают высокие требования на объём доступной оперативной памяти, мы настоятельно рекомендуем использовать 64битные версии программы и операционной системы для работы с ними.

Чтобы проделать это шаг за шагом и получить такой же результат, как представлен в уже обработанном файле, должна быть проведена следующая процедура:

1. Нажатием правой кнопкой мыши в окне данных, откройте браузер метаданных и запишите значение forceConstant, которое в данном эксперименте задаёт жесткость кантелевера.
2. Добавьте сегментирование к данным используя модуль Разделить на сегменты. Используйте режим сегментации Подвод/Отвод и кривую ZHeight. Тип вывода должен быть 'Пометить'.
3. Используйте модуль Конвертировать кривую FZ в FD чтобы убрать влияние жесткости кантелевера с данных, т.е. преобразовать высоту основания кантелевера в расстояние между зондом и образцом. Мы будем здесь использовать жесткость кантелевера. Следует заметить, что она отличается от спецификации поставщика зондов, следовательно она скорее всего была измерена в ходе эксперимента, что является важным шагом к количественным измерениям. Выберите ZHeight в качестве Абсциссы, Force в качестве Ординаты и Height в качестве входного Z.

4. Рассчитайте результаты используя модуль Наномеханическая аппроксимация, используя показанные ниже настройки :



Снимок экрана модуля Аппроксимации наномеханики применяемого к данным этого примера.

В этом модуле можно пересчитать и предварительно посмотреть отдельные каналы. После нажатия кнопки OK, вы должны получить набор изображений, представляющих пространственное распределение различных параметров наномеханики.

4.28 Синтетические поверхности

Помимо функций для анализа измеренных данных Gwyddion предлагает несколько генераторов искусственных поверхностей которые можно также использовать для тестирования или моделирования вне Gwyddion [1].

Все генераторы поверхностей имеют некоторый общий набор параметров, определяющих размеры и масштабы созданной поверхности и элементов управления генератором случайных чисел. Эти параметры описаны ниже, параметры, специфичные для каждого генератора описаны в соответствующих подразделах.

Параметры изображения:

Горизонтальный, вертикальный размер Горизонтальное и вертикальное разрешение создаваемой поверхности в пикселях.

Квадратное изображение Включение этой опции делает горизонтальное и вертикальное разрешения одинаковыми.

Ширина, высота Горизонтальные и вертикальные физические размеры создаваемой поверхности в выбранных единицах. Следует отметить, что квадратные пиксели считаются таковыми, изменение одного параметра ведёт к изменению другого.

Единицы измерения пространства и значений Единицы измерения пространственных размеров (Ширина, Высота) и значений (высот). Выбранные здесь единицы измерения также определяют единицы измерения не безразмерных параметров отдельных генераторов.

Взять размеры текущего изображения Нажатие этой кнопки приводит к заполнению всех вышеперечисленных параметров в соответствии с текущим изображением.

Следует отметить, что хотя единицы измерения значений обновляются, масштаб значений определяется зависящими от генератора параметрами, которые могут не выводиться напрямую из статистических свойств текущего изображения. Следовательно, эти параметры не пересчитываются.

Заменить текущее изображение Эта опция имеет двойной эффект. Во первых, она заставляет размеры и масштабы автоматически устанавливаться равными текущему изображению. Во вторых, при этом генерируемая поверхность заменяет текущее изображение вместо создания нового.

Начать с текущего изображения Эта опция имеет двойной эффект. Во первых, она заставляет размеры и масштабы автоматически устанавливаться равными текущему активному изображению. Во вторых, она заставляет генератор начать с поверхности, содержащейся в текущем изображении и модифицировать её вместо плоской поверхности. Следует отметить, что это не влияет на то, будет ли результат записан в текущее изображение или будет создано новое.

Элементы управления генератором случайных чисел:

Случайное зерно Начальное число генератора случайных чисел. При выборе тех же параметров и разрешений и того же начального числа генерируется та же самая поверхность, даже на разных компьютерах. Различные начальные числа приводят к генерации разных поверхностей с теми же общими характеристиками, заданными параметрами генератора.

Новый Заменяет начальное число случайным.

Сделать случайным Включение этой опции приводит к тому, что начальное число выбирается случайно при каждом запуске генератора. Это позволяет удобно перезапускать генератор просто нажимая Ctrl-F (см. раздел клавиатурные сокращения).

Обновить/просмотреть элементы управления:

Обновлять сразу Если этот флаг включен, поверхность рассчитывается заново после каждого изменения входных параметров. Эта опция доступна для генераторов которые работают относительно быстро.

Прогрессивное обновление Если этот флаг включен, изображение предпросмотра показывает развитие морфологии поверхности в процессе симуляции. Эта опция доступна для медленных генераторов, которые задействуют итерационные физические модели. Включение прогрессивного обновления в общем случае слегка замедляет симуляцию, поскольку снимки требуют некоторого времени для своего получения и отображения.

Спектральный

Модуль спектрального синтеза создаёт случайно шероховатые поверхности путём синтеза преобразования Фурье поверхности в соответствии с заданными параметрами и затем применением обратного преобразования Фурье для получения реальной поверхности. Генерируемые поверхности являются периодическими (т.е. идеально гладко сшиваются на границах).

Параметры Фурье-образа определяют форму функции спектральной плотности мощности, т.е. модулей коэффициентов Фурье, фазы задаются случайно. В настоящий момент все создаваемые поверхности изотропны, т.е. функция спектральной плотности мощности радиально симметрична.

Ср. квадр. Среднеквадратичное значение высот (или отличий от средней плоскости, которая, однако, всегда является плоскостью $z = 0$). Кнопка как у текущего изображения устанавливает значение среднеквадратичного отклонения равным таковому для текущего изображения.

Минимальная, максимальная частота Минимальная и максимальная пространственные частоты. Увеличение минимальной частоты ведёт к «уплощению» изображения, т.е. удалению крупных выделяющихся частей. Уменьшение максимальной частоты ограничивает остроту выступающих частей.

Разрешить гауссов множитель Включает умножение коэффициентов Фурье на гауссову функцию, что в реальном пространстве соответствует свёртке с гауссианой.

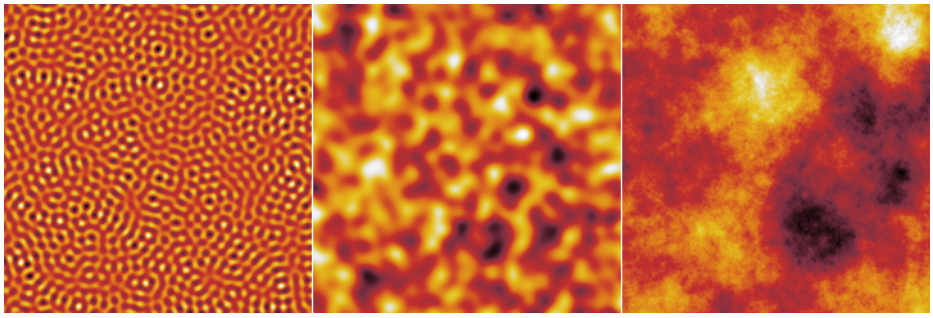
Разрешить лоренцев множитель Включает умножение коэффициентов в разложении Фурье на функцию, пропорциональную $1/(1+k^2T^2)^{3/4}$, где T — длина автокорреляции. Таким образом, сам множитель фактически не является лоренцевым, но он соответствует лоренцевой одномерной плотности спектра мощности,

которая в свою очередь соответствует экспоненциальной функции автокорреляции (подробное обсуждение функций автокорреляции приведено в разделе Статистический анализ). Этот множитель убывает сравнительно медленно, таким образом, ограниченное разрешение играет обычно большую роль, чем в случае с гауссовым.

Длина автокорреляции Длина автокорреляции гауссова или лоренцева множителя (подробное обсуждение функций автокорреляции приведено в разделе Статистический анализ).

Разрешить степенной множитель Включает умножение коэффициентов в разложении Фурье на множитель, пропорциональный $1/k^p$, где k - пространственная частота и p - степень. Это позволяет создавать различные фрактальные поверхности.

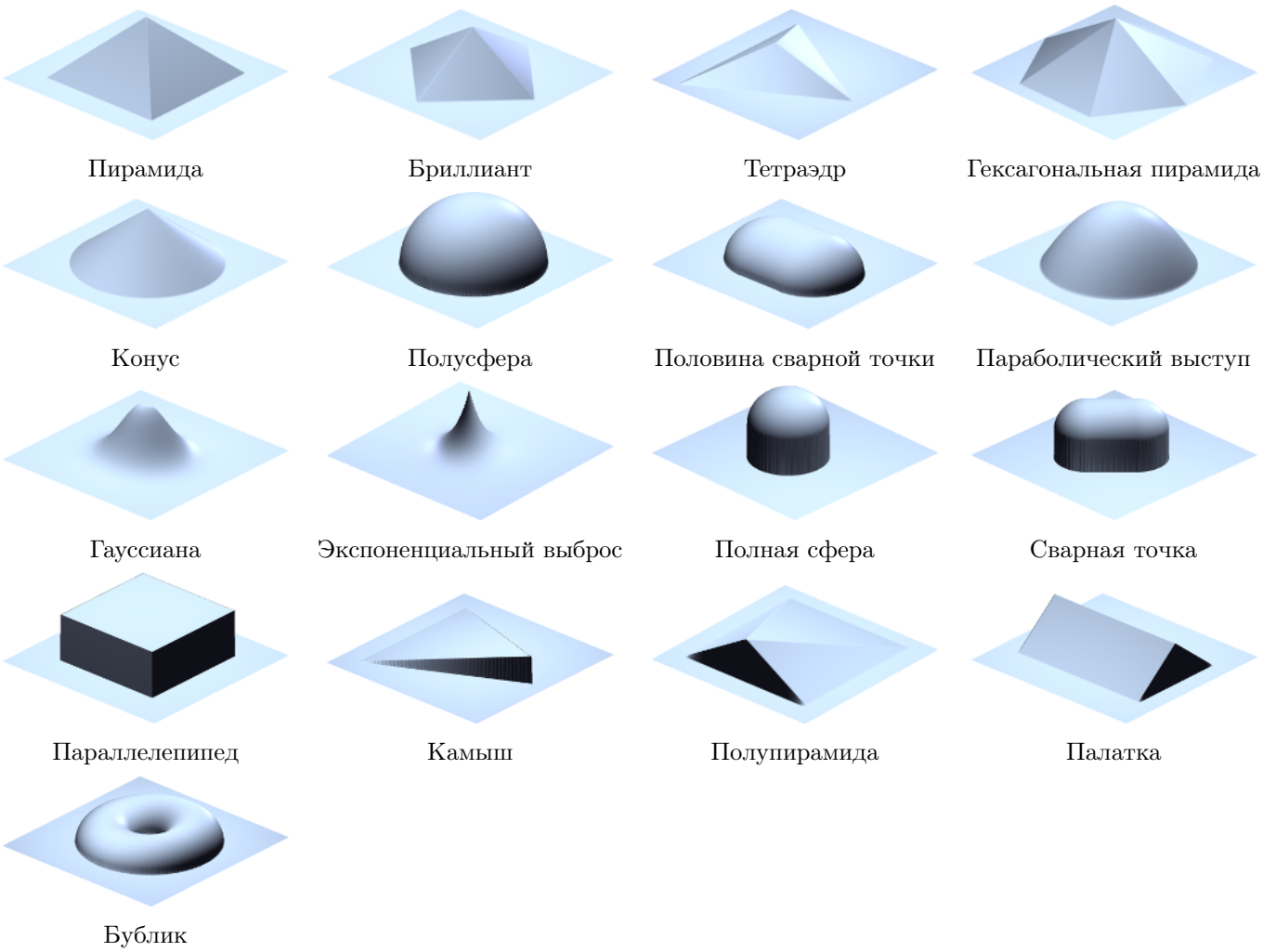
Степень Степень p.



Искусственные поверхности созданные спектральным синтезом: узкий диапазон пространственных частот (слева), гауссова случайная поверхность (по центру) и фрактальная поверхность, созданная со степенным множителем и p равными 1,5 (справа).

Объекты

Метод размещения объектов позволяет создавать случайные поверхности, состоящие из выступающих частей определённой формы. Алгоритм прост: заданное число объектов помещается в случайные места поверхности. Для каждого из размещаемых объектов, новые высоты меняются на $\max(z, z_0 + h)$, где z – текущая высота отдельной точки, h – высота объекта в этой точке (подразумевая нулевой базис) и z_0 – текущая минимальная высота над базисом помещаемого объекта. Алгоритм рассматривает горизонтальную плоскость как заполненную идентичными копиями поверхности, следовательно, и сама поверхность будет периодически повторяющейся (т.е. будет идеально совмещаться сама с собой на границах при использовании в качестве текстуры).



Параметры и настройки на вкладке Форма управляют формой отдельных особенностей:

Форма Форма (тип) размещаемых объектов. В настоящее время возможные варианты включают: полусферы, прямоугольные параллелепипеды, различные пирамиды, бугры, иглы и некоторое количество более странных форм. Разница между полусферой и полной сферой состоит в высоте. Полная сфера включает также высоту нижней половины. То же самое относится и к сварным точкам.

Размер Пространственный размер объекта, обычно сторона описанного квадрата.

Пропорции Соотношение между размерами по x и y объекта по отношению к некоторым пропорциям по умолчанию.

Изменение соотношения сторон не всегда подразумевает простое геометрическое масштабирование, например, объекты, называемые частицами меняют форму от полусфер до стержней при изменении соотношения сторон.

Высота Величина, пропорциональная высоте объекта, обычно высота самой высокой точки.

Включение опции Масштабируется с размером заставляет невозмущенные высоты масштабироваться пропорционально размерам отдельных объектов. В противном случае высота не зависит от размера. Пропорциональное масштабирование полезно при использовании ненулевого разброса размеров чтобы сохранить форму всех объектов одинаковой (в противоположность их вертикальному удлинению и уплощению). Если все объекты имеют одинаковый размер, опция никак не влияет на результат.

Кнопка как у текущего изображения устанавливает значение высоты равным значению, основанном на среднеквадратичном отклонении текущего изображения.

Усечение Фигуры могут быть усечены на определённой высоте для создания усечённых конусов, пирамид, и т.п. Высота усечения задаётся в долях от общей высоты объекта. Единица означает неусечённую фигуру, ноль – полное удаление объекта.

Каждый параметр может быть задан случайно для отдельных объектов, это задаётся опцией Разброс. Для мультипликативных величин (все, кроме ориентации и усечения), распределение логарифмически нормальное со значением среднеквадратичного отклонения логарифма величины заданным параметром Разброс.

Параметры и настройки на вкладке Размещение управляют где и как поверхность будет меняться с помощью сгенерированных фигур:

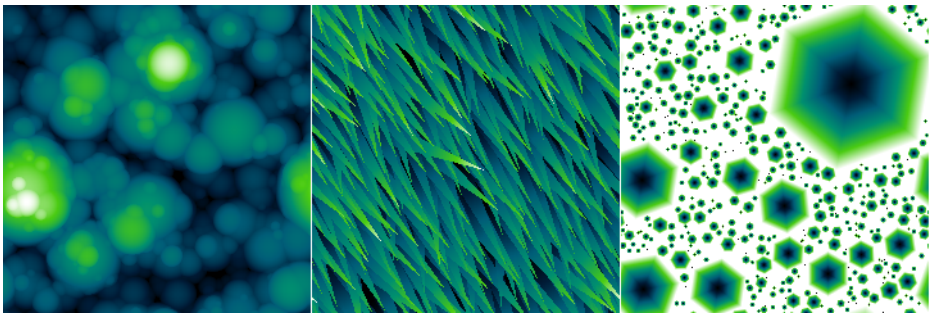
Покрытие Среднее количество раз, которое объект перекрывает пиксель изображения. Значение покрытия 1 означает что поверхность будет ровно один раз покрыта объектами, при этом они будут покрывать её равномерно. Большие значения означают больше слоёв объектов и более медленную генерацию изображения.

Направление особенности Направление изменения поверхности при добавлении объектов. Положительные и отрицательные изменения соответствуют образованию высот и впадин при добавлении объектов соответственно. Нулевое значение параметра означает что выступы и впадины выбираются случайно. Положительное значение делает выступы более вероятными, максимальное значение, равное 1 соответствует формированию только выступов. То же самое справедливо для отрицательных значений и впадин.

Рост плёнки колоннами Для столбчатости равной нулю локальная модификация поверхности работает как описано во введении. Для столбчатости равной одному (максимальной) объекты считаются имеющими также нижнюю часть, которая является идеальным зеркальным отражением (видимой) верхней части. Как только нижняя часть касается любой точки поверхности, она прилипает к ней. Это задаёт итоговую высоту. Диапазон высот растёт быстро в данном случае и объём будет достаточно пористым (что не представлено полем высот, разумеется). Значения между 0 и 1 означают что высота объекта интерполируется между двумя экстремумами.

Избегать наложения Если эта опция включена, на любой пиксель поверхности может быть помещено не более одного объекта. Следовательно, они никогда не будут пересекаться. Опция Покрытие в данном случае не задаёт сколько объектов будет реально помещено на поверхность, а только количество попыток генератора разместить объект. Как только не остаётся свободного места, куда можно поместить объект заданного размера, увеличение покрытия не будет влиять на результат (только замедлять генерацию).

Ориентация Поворот решетки по отношению к определённому исходному направлению, измеренный против часовой стрелки. Ориентация также может быть сделана случайной используя соответствующую настройку Разброса.



Искусственные поверхности, созданные размещением объектов: сфер различного размера (слева), узких камышовых листьев различного направления (по центру), отрицательных непересекающихся гексагональных пирамид разного размера (справа).

Чвстицы

Осаждение частиц проводит динамическое моделирование падения взаимодействующих сферических частиц на твёрдую поверхность. Частицы не падают все одновременно. Вместо этого, они падают последовательно между частицами уже лежащими на поверхности и им даётся время для релаксации.

Радиус частицы Радиус сферических частиц в физических единицах. Высота и пространственные размеры должны быть одной и той же физической величиной, следовательно, тут будет только один параметр размерности.

Ширина распределения Стандартное отклонение распределения радиуса (гауссова).

Покрытие Какая часть поверхности должна быть покрыта, если она равномерно покрывается осаждаемыми частицами. если модель не может разместить требуемого числа частиц, обычно вследствие слишком малого времени симуляции, выводится сообщение об ошибке.

Шагов релаксации Длина моделирования, измеренная в количестве шагов.

Метод осаждения стержней основан на том же динамическом моделировании, но для продолговатых частиц. Частицы в действительности формируются триплетами сфер, тем не менее, это позволяет получить достаточно вменяемый диапазон соотношений размеров частиц. Модель также имеет несколько дополнительных параметров взаимодействия.

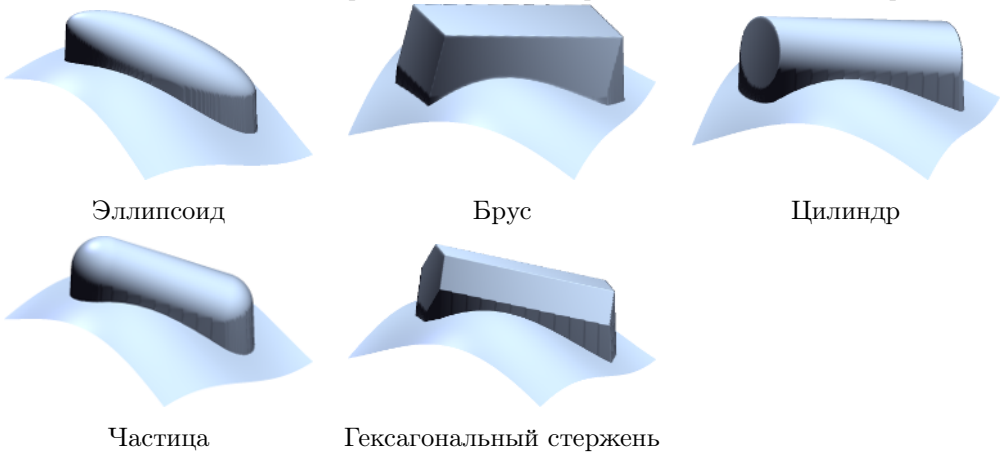
Нагромождение

Генератор искусственных поверхностей Объекты достаточно быстр, но это достигается избеганием любых видов трёхмерной геометрии и только тем, что поверхность изменяется по простым правилам. Модули осаждения частиц и стержней лежат около другого конца спектра скорость-реализм и действительно выполняют динамическое моделирование падения на поверхность взаимодействующих частиц. Этот модуль лежит посередине, поскольку он формирует поверхность из реальных трёхмерных твёрдых объектов, но по прежнему использует только простые правила для того, что происходит с ними когда они касаются поверхности, сохраняя хорошую скорость генерации поверхности.

Объекты начинают падать из горизонтального положения. Когда они касаются поверхности, находится положение локальной средней плоскости вокруг области контакта. Фигура после этого поворачивается так, чтобы лежать прямо на этой локальной плоскости, её финальная высота определяется как подробнее описано в описании Столбчатости ниже, и затем она просто прилипает в этом положении. Дальнейшее соскальзывание, кувыркание, обрушение и прочие динамические усадочные процессы не моделируются.

Некоторые параметры генератора имеют точно такое же значение, что и для синтеза Объектов. Это включает в себя Покрытие, Избегать наложения и Ориентация. Остальные описаны ниже:

Форма Форма (вид) помещаемых объектов. В настоящее время возможные варианты включают в себя различные удлинённые формы.



Ширина Формы могут быть вытянуты вдоль оси x (что контролируется опцией Соотношение сторон). Их размер в перпендикулярном направлении задаётся шириной. Поперечное сечение будет симметричным. Следовательно, ширина задаёт сразу и горизонтальную ширину, и высоту.

Соотношение сторон Отношение между размерами вдоль направлений x и y. Другими словами, вытянутость. Оно всегда не меньше единицы, формы никогда не сжимаются вдоль оси x. Следовательно, распределение соотношения размеров может быть сильно асимметричным, если номинальное значение близко к единице и разброс велик.

Рост плёнки колоннами В общем случае, этот параметр влияет на то, насколько фигуры склонны образовывать колоннообразные структуры (пористые, если топографические данные могут это представить). Значение по умолчанию, равное нулю, можно представить как если бы нижняя часть фигуры плавилась при взаимодействии и заполняла впадину, куда она упала. Следует отметить, что объёмное равновесие является в какой-то мере приблизительным и высота, на которой застревает объект может быть такой, что острые выступы на поверхности пробивают его насквозь.

Максимальная столбчатость (1) означает, что как только любая часть формы касается поверхности, она прилипает к ней. Для меньших положительных значений финальная высота интерполируется парой высот, заданной двумя подходами.

Если столбчатость отрицательна, форма вбита в поверхность. Для минимального значения (-1) оно опускается на наименьшую высоту, для которой по крайней мере одна точка всей её нижней границы не будет ниже оригинальной поверхности. Снова, для других отрицательных значений финальная высота будет интерполирована.

Искусственные поверхности, создаваемые нагромождением геометрических форм: направленных гексагональных брусьев на центральном гребне (слева), беспорядочная куча элипсоидальных игл (по центру), куча кубов наваленных на центральную колонну (справа).

Шум

Случайный некоррелированный точечный шум генерируется независимо в каждой точке. Доступно несколько распределений.

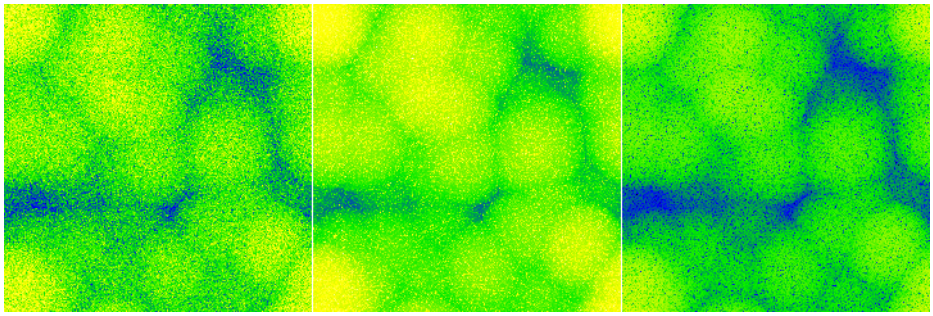
Распределение Распределение значения шума. Варианты включают в себя гауссово, экспоненциальное, равномерное и треугольное распределения, распределение вида соль и перец.

Распределение вида соль и перец работает несколько отлично от того, которое является привычным для работающих с компьютерной графикой, поскольку диапазон значений неограничен. Это бимодальное распределение состоящее из двух δ-функций. Другими словами, константа (задаваемая с помощью RMS) добавляется и/или вычитается из каждого значения пикселя.

Направление Шум можно генерировать как симметричный, так и односторонний. Среднее значение распределения симметричного шума равно нулю, т.е. среднее значение данных не меняется при добавлении симметричного шума. Односторонний шум только увеличивает (положительный) или уменьшает (отрицательный) значения данных.

Ср. квадр. Среднеквадратичное значение распределения шума. Точнее, среднеквадратичное соответствующего симметричного распределения в случае одностороннего шума.

Плотность Плотность показывает долю значений, которые будут изменяться. Если она равна 1, то изменятся все пиксели изображения. Если она меньше, некоторые останутся неизменными.



Различные виды искусственного шума, добавленные к одной и той же поверхности: симметричный гауссов шум (слева), положительный экспоненциальный шум (по центру), отрицательный экспоненциальный шум (справа). Все изображения показаны с одинаковой шкалой псевдоцвета и все виды шума имеют одинаковое среднеквадратичное отклонение.

Линейный шум

Линейный шум представляет собой шум с длительностью больше пренебрежимо малой, который приводит к типичным ступеням или царапинам (они же называются штрихами) в направлении быстрой оси сканирования или смещенным линиям сканирования. Параметры Распределение, Направление и Среднеквадратичное отклонение имеют те же значения, что и для точечного шума. Другие параметры управляют пространственными характеристиками шума.

Доступны следующие основные типы линейных дефектов:

- Ступеньки представляет собой резкое изменение значений которое продолжается до конца скана (или до возникновения следующей ступени).
- Царапины это локальные изменения значения с конечной длиной, т.е. значения возвращаются к оригинальному уровню в пределах той же линии скана.
- Борозды подобны царапинам, но на большем масштабе: они могут продолжаться на несколько линий сканирования.
- Наклон создает разброс наклонов отдельных линий сканирования, в противоположность тому, чтобы напрямую сдвигать их высоту.
- Автогенерация (жужжание) добавляет квазипериодическое возмущение, моделирующее тип шума возникающий из электронных помех.

Ступеньки имеют следующие параметры:

Плотность Среднее число дефектов на линию скана, включая любое время простоя (которое определяется параметром Рабочий ход).

В пределах линии Доля времени сканирования линии, которая тратится непосредственно на снятие данных. Остальное время относится к холостому ходу. Значение 1 соответствует случаю нулевого времени холостого хода, т.е. все ступени появляются в пределах изображения. Значение 0 означает, что время снятия данных пренебрежимо мало к общему времени сканирования линии, следовательно, ступени могут встречаться только между линиями.

Направление сканирования Если ступени могут возникать внутри линии сканирования это задаёт горизонтальное направление сканирования (предполагается что медленная ось сканирования направлена сверху вниз). Для сканирования слева направо левая часть линии сканирования будет непрерывна с данными выше и нижняя с данными ниже. Для сканирования справа налево наоборот. Два направления проиллюстрированы в описании Блочной коррекции ступеней, которая исправляет подобные артефакты.

Кумулятивные Для кумулятивных ступеней случайное значение всегда добавляется к текущему значению данных; для одиночных ступеней новое смещение данных напрямую равно случайному значению смещения.

Для царапин доступны следующие параметры:

Покрытие Доля изображения покрытая дефектами, если они не пересекаются. Поскольку дефекты могут пересекаться, значение покрытия 1.0 не означает, что изображение полностью закрыто объектами.

Длина Длина царапины в пикселях.

Разброс Разброс длины царапины, описание в разделе объекты.

Гребни имеют следующие параметры:

Плотность Среднее число дефектов на линию скана, включая любое время простоя (которое определяется параметром Рабочий ход).

В пределах линии Доля времени сканирования линии, которая тратится непосредственно на снятие данных. Остальное время относится к холостому ходу. Значение 1 соответствует случаю нулевого времени холостого хода, т.е. все ступени появляются в пределах изображения. Значение 0 означает, что время снятия данных пренебрежимо мало к общему времени сканирования линии, следовательно, ступени могут встречаться только между линиями.

Направление сканирования Если ступени могут возникать внутри линии сканирования это задаёт горизонтальное направление сканирования (предполагается что медленная ось сканирования направлена сверху вниз). Для сканирования слева направо левая часть линии сканирования будет непрерывна с данными выше и нижняя с данными ниже. Для сканирования справа налево наоборот. Два направления проиллюстрированы в описании Блочной коррекции ступеней, которая исправляет подобные артефакты.

Ширина Средняя длина дефекта, измеренная в единицах размера изображения. Значение 1 означает что средней длиной будет всё время сканирования изображения. Малые значения означают что дефекты в основном будут занимать только одну линию сканирования.

Наклон имеет следующие параметры:

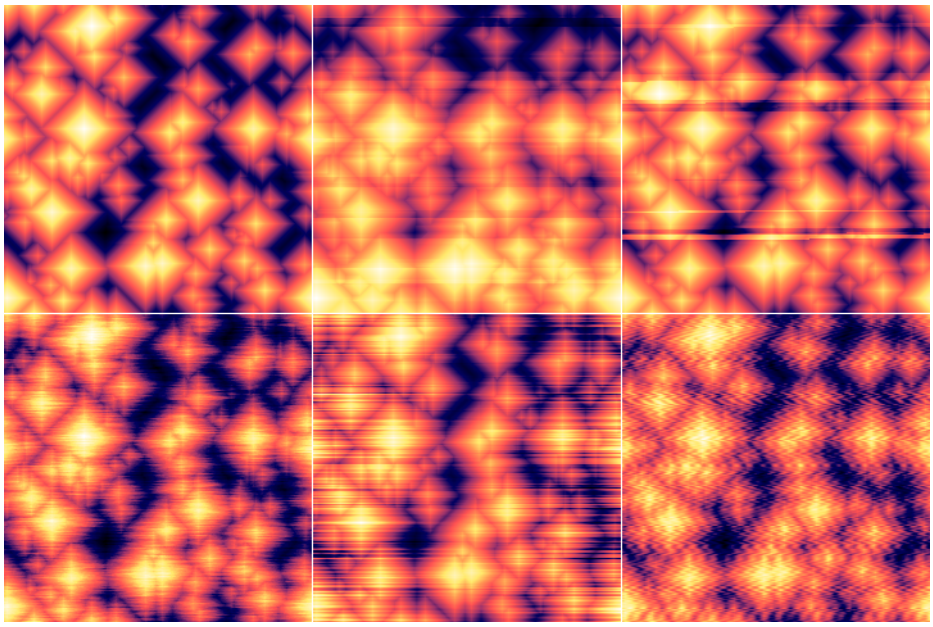
Разброс смещений С нулевым смещением все линии сканирования наклонены относительно середины. Другими словами, центральный столбец изображения не искажается. Увеличение разброса смещений случайно сдвигает точки поворота больше и больше влево и вправо от центра.

Гудение имеет следующие параметры:

Длина волны Характеристическая частота жужжания, измеренная в размерах изображения.

Разброс Малый разброс означает что шум будет очень узкополосным и будет выглядеть более-менее похоже на чистую синусоидальную волну. Большие значения порождают более широкий спектр с биениями и более искаженным профилем.

Компоненты Число случайных синусоидальных компонент, которые будут использованы чтобы сконструировать шум в каждой линии сканирования.



Различные виды линейного шума добавленные к искусственной пирамидальной поверхности: Верхний ряд: исходная поверхность (слева); относительно редкие кумулятивные ступени (по центру); относительно редкие борозды (справа). Нижний ряд: царапины со средней длиной 16 пикселей и высокой степенью покрытия (слева); наклон с малым разбросом смещений (по центру); автогенерация с настройками по умолчанию (справа).

Структура

Правильные геометрические текстуры, представляют поверхности, часто встречающиеся в микроскопии в качестве стандартов или тестовых образцов. В настоящее время может генерировать следующие типы текстур:

Лестница Одномерную лестничную текстуру, сформированную ступенями постоянной ширины и высоты.

Решетка Одномерная текстура, сформированная двусторонними ступенями (гребнями) постоянной ширины и высоты.

Амфитеатр Текстура в виде суперэллипса, сформированная ступенями постоянной ширины и высоты.

Концентрические круги Текстура в виде суперэллипса, сформированная двусторонними ступенями (гребнями) постоянной ширины и высоты.

Звезда Сименса Круговая текстура, сформированная сменяющими друг друга высокой и низкой кромками.

Отверстия (прямоугольные) Двумерная регулярная структура из прямоугольных отверстий, возможно квадратных.

Колонны Двумерная правильная упорядоченная структура симметричных колонн нескольких возможных видов (круглых, квадратных или шестигранных).

Двойная лестница Двумерная регулярная структура из ступеней фиксированной ширины и высоты.

Каждый тип текстуры имеет свой набор геометрических параметров, задающих форму и размер различных частей текстуры. Они описаны в следующих разделах. Большая часть геометрических параметров имеет также связанное с ними управление разбросом, подобное используемому в синтезе объектов, что позволяет сделать некоторые аспекты текстуры менее упорядоченными.

Расположение структуры на горизонтальной поверхности управляется параметрами на вкладке Положение, общей для всех видов шаблонов:

Ориентация Поворот текстуры по отношению к определённому исходному направлению, измеренный против часовой стрелки.

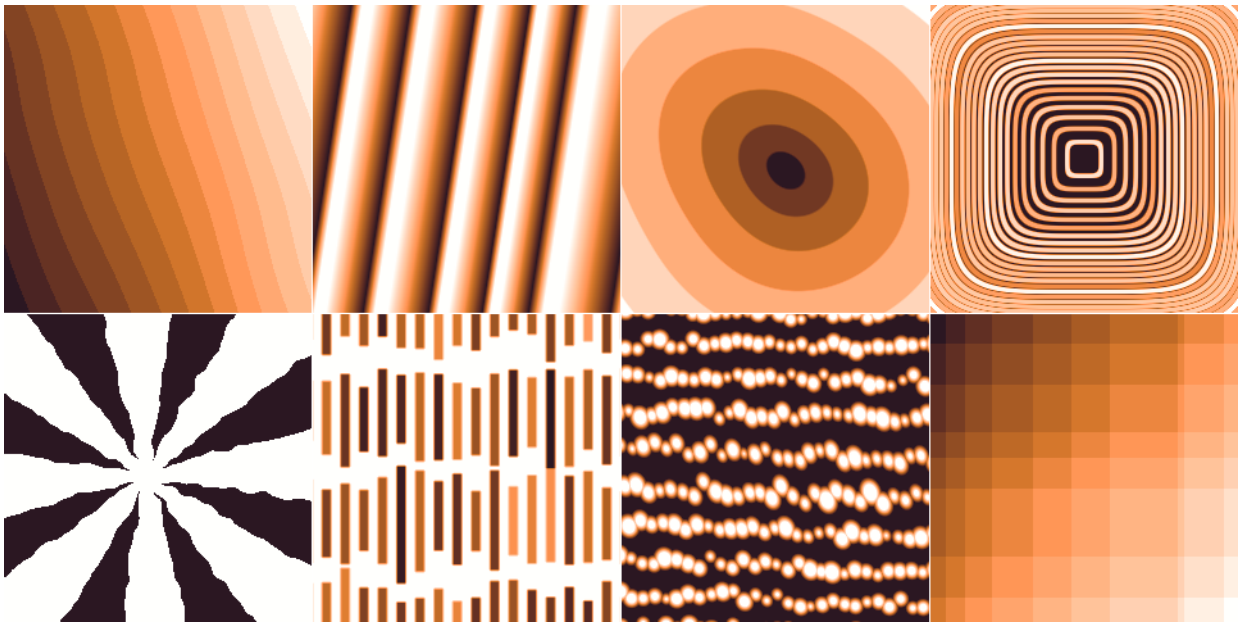
Эта вкладка также содержит параметры деформации. Включение разброса параметров делает поверхность в какой-то степени неправильной, однако, форма характерных особенностей поддерживается неизменной. Это дополняется другим методом изменения, называемым Деформация который разрешает искажение шаблона в плоскости xy. У деформации есть два параметра:

Амплитуда Величина пространственной деформации. Относительная численная величина в основном определяющая как далеко может зайти деформация.

Пространственный масштаб Характерный размер деформаций. Он описывает не как далеко смещаются характерные части изображения, а как резко или медленно сама деформация меняется вдоль горизонтальной плоскости.

Деформация работает аналогично двумерной гауссовой деформации, применяемой с помощью поля смещения. Однако, в данном случае она применяется к координатной системе перед тем, как отрисовывать текстуру, в то время, как поле смещения искажает уже дискретизированные изображения.

Все текстуры также имеют параметр Высота, задающий высоту элементов текстуры в физических единицах измерения. Для текстур по типу лестницы, которые растут непрерывно этот параметр задаёт высоту одной ступени. Для текстур, состоящих из выступов или впадин относительно ровной базовой плоскости этот параметр задаёт высоту одного отдельного элемента (если она не модифицирована Разбросом).



Поверхности на основе искусственных текстур. Верхний ряд: острые ступени, деформированные с большой длиной волны, масштабированная решетка с большим разбросом ширины и широкими асимметричными уклонами, слегка деформированный амфитеатр с отрицательной параболичностью, и концентрические круги с положительной параболичностью и меняющейся высотой. Нижний ряд: звезда Сименса с увеличенной верхней гранью, длинные прямоугольные отверстия с меняющимся вертикальным размером и положением, ряды слегка деформированных круглых колонн и двойная лестница с меняющейся шириной ступени.

Лестница

Лестница имеет следующие особые параметры:

Ширина террасы Ширина одной ступени, заданная в пикселях, но также отображаемая в физических единицах. Все остальные размеры в горизонтальной плоскости задаются как доля этой базовой ширины.

Ширина включает в себя ширину наклонной части и может рассматриваться как «период» текстуры.

Разброс положения Случайное положение кромки ступени. Кромки никогда не пересекаются. Даже для максимального уровня случайности, они могут максимум коснуться края следующей ступени.

Ширина уклона Доля ширины, занятая наклонной кромкой. нуль означает острые ступени, единица означает, что текстура будет ровным уклоном (без рандомизации или влияния других модифицирующих параметров).

Масштабируется с длиной Если включено для высоты ступени, высота будет настраиваться чтобы быть пропорциональной ширине окружающих террас, при этом сохраняя среднюю высоту ступеней заданной. Этот подход наиболее близко сохраняет среднюю плоскость поверхности даже для случайной ширины ступеней.

Решетка

Решетка имеет следующие особые параметры:

Период Период текстуры, заданный в пикселях, но также отображаемый в физических единицах. Все остальные размеры в горизонтальной плоскости задаются как доля этой базовой ширины.

Разброс положения Рандомизация ширины отдельных пар гребень-желоб.

Масштабировать особенности с шириной Если включено, то все горизонтальные размеры масштабируются пропорционально ширине каждой отдельной пары гребень-впадина для рандомизированных текстур. В противном случае Верхняя доля или Ibhbyf yfrkjyf относятся к невозмущенному базовому периоду текстуры.

Верхняя фракция Доля ширины, приходящаяся на верхнюю поверхность.

Ширина уклона Доля ширины, приходящаяся на наклонные грани. Грани добавляются к верхней поверхности, но не заменяют её. Следовательно нулевая Доля верхней фракции и ненулевой наклон будет приводить к треугольным профилям.

Асимметрия Распределение ширины уклона для левых и правых кромок. Минус один означает что левые кромки будут наклонными и правые острыми. Плюс один означает что левые будут острыми и правые наклонными. Ноль обозначает симметричные уклоны.

Амфитеатр

Амфитеатр имеет следующие особые параметры:

Параметр суперэллипса Контуры ступени это суперэллипсы, описываемые уравнением $(x^{2/p}+y^{2/p})^{p/2}=\mathrm{const.}$ где p. Нулевое значение соответствует квадратам, максимальное значение, равное двум, соответствует ромбам, значение по умолчанию, равное единице, соответствует кругам.

Ширина террасы Ширина одной ступени, заданная в пикселях, но также отображаемая в физических единицах. Все остальные размеры в горизонтальной плоскости задаются как доля этой базовой ширины.

Ширина включает в себя ширину наклонной части и может рассматриваться как «период» текстуры.

Разброс положения Случайное положение кромки ступени. Кромки никогда не пересекаются. Даже для максимального уровня случайности, они могут максимум коснуться края следующей ступени.

Параболичность Положительные значения означают, что терраса становится уже с увеличением расстояния от центра и весь профиль становится ближе к параболическому. Отрицательные значения приводят к обратному эффекту, общая форма становится параболой, лежащей на боку.

Ширина уклона Доля ширины, занятая наклонной кромкой. нуль означает острые ступени, единица означает, что текстура будет конусом (без рандомизации или влияния других модифицирующих параметров).

Концентрические круги

Концентрические окружности имеют следующие особые параметры:

Параметр суперэллипса Контуры колец это суперэллипсы, описываемые уравнением $(x^{2/p}+y^{2/p})^{p/2}=\mathrm{const.}$ где p. Нулевое значение соответствует квадратам, максимальное значение, равное двум, соответствует ромбам, значение по умолчанию, равное единице, соответствует кругам.

Период Период текстуры, заданный в пикселях, но также отображаемый в физических единицах. Все остальные размеры в горизонтальной плоскости задаются как доля этой базовой ширины.

Поскольку эта текстура является радиальной, период надо рассматривать как отсчитываемый при движении по радиусу от центра наружу.

Разброс положения Рандомизация ширины отдельных пар гребень-желоб.

Параболичность Положительные значения означают, что терраса становится уже с увеличением расстояния от центра и весь профиль становится ближе к параболическому. Отрицательные значения приводят к обратному эффекту, общая форма становится параболой, лежащей на боку.

Масштабировать особенности с шириной Если включено, то все горизонтальные размеры масштабируются пропорционально ширине каждой отдельной пары гребень-впадина для рандомизированных текстур. В противном случае Верхняя доля или Ibhbyf yfrkjyf относятся к невозмущенному базовому периоду текстуры.

Верхняя фракция Доля ширины, приходящаяся на верхнюю поверхность.

Ширина уклона Доля ширины, приходящаяся на наклонные грани. Грани добавляются к верхней поверхности, но не заменяют её. Следовательно нулевая Доля верхней фракции и ненулевой наклон будет приводить к треугольным профилям.

Асимметрия Распределение ширины наклонов между левой и правой кромкой. Минус один означает, что внутренние кромки будут наклонными и внешние острыми. Плюс один делает внутренние острыми и внешние наклонными. Нулевое значение задаёт одинаковые наклоны в обе стороны.

Звезда Сименса

Звезда Сименса имеет следующие особые параметры:

Количество секторов Число круговых секторов, на которые делится плоскость. Каждый сектор содержит верхнюю и нижнюю поверхность, так что количество кромок будет удвоенным числом секторов.

Верхняя фракция Доля углов, приходящаяся на верхнюю поверхность.

Сдвиг края Сдвиг кромки по отношению к радиальным ступицам, собирающимся вместе в центре. Положительные значения означают что верхняя поверхность увеличивается при сдвиге, отрицательные увеличивают нижнюю поверхность. Сдвиг не меняет асимптотическую долю верхней поверхности (для радиуса, стремящегося к бесконечности), но он меняет центр текстуры.

Отверстия (прямоугольные)

Прямоугольные отверстия имеют следующие особые параметры:

Период по X и период по Y Горизонтальный и вертикальный периоды текстуры, задаваемые в пикселях, но также отображаемые в физических единицах измерения. Все остальные пространственные размеры задаются как доля от меньшего из этих двух размеров.

Разброс положения Случайный выбор положения отверстий по отношению к центру прямоугольника.

Верхняя фракция по X и Верхняя фракция по Y Доля ширины занятой верхней поверхностью на горизонтальных и вертикальных профилях, проходящих через центр отверстия. Поскольку размеры задаются как две доли, соотношение сторон отверстия масштабируется пропорционально двум соответствующим периодам.

Верхняя грань обычно имеет большую площадь поскольку некоторые профили не пересекают отверстий – и может ещё больше увеличиваться за счёт скругления углов.

Ширина уклона Доля размера (меньшей стороны базового прямоугольника) занимаемая наклонными гранями. Наклон будет одинаковым в обоих направлениях.

Наклоны добавлены к верхней поверхности, они её не заменяют. Следовательно, нулевая верхняя поверхность и ненулевой наклон приводят к треугольным профилям.

Округлость Радиус закругления углов, задаваемый как доля размера (меньшей стороны базового прямоугольника).

Колонны

Колонны имеют следующие особые параметры:

Форма Форма основания колонны, которая может быть круглой, квадратной или гексагональной.

Период по X и период по Y Горизонтальный и вертикальный периоды текстуры, задаваемые в пикселях, но также отображаемые в физических единицах измерения. Все остальные пространственные размеры задаются как доля от меньшего из этих двух размеров.

Разброс положения Случайный выбор положения колонн по отношению к центру прямоугольника.

Размер Ширина колонны, заданная как доля размера (меньшей стороны базового прямоугольника). Колонны симметричны и их соотношение сторон не масштабируется вместе с прямоугольником.

Ширина уклона Доля размера (меньшей стороны базового прямоугольника) занимаемая наклонными гранями. Наклон будет одинаковым в обоих направлениях.

Наклоны добавлены к верхней поверхности, они её не заменяют. Следовательно, нулевая верхняя поверхность и ненулевой наклон приводят к треугольным профилям.

Ориентация Поворот отдельных колонн по отношению к прямоугольной базовой решетке. Например, квадратные колонны в базовой ориентации будут выглядеть похоже на текстуру отверстий (только инвертированную), в то время как они же, но повернутые на 45 градусов образуют шахматную текстуру.

Двойная лестница

Двойная лестница имеет следующие особые параметры:

Ширина террасы по X width и Ширина террасы по Y Ширина и высота одной ступени в горизонтальном и вертикальном направлениях, задаваемая в пикселях, но также отображаемая в физических единицах длины. Может рассматриваться как «периоды» текстуры.

Столбчатые плёнки

Модель вертикального роста плёнок (колоннами) использует простой механизм осаждения на основе алгоритма Монте-Карло, в котором малые частицы падают на поверхность с направлений, заданных нижеуказанными параметрами, прилипают к поверхности вблизи точки падения и увеличивают там локальную высоту. Эффект затенения при этом заставляет больше частиц прилипать к более высоким точкам поверхности, и меньше к более низким. Положительная обратная связь по высоте приводит к образованию колонн. Алгоритм рассматривает горизонтальную плоскость, заполненную идентичными копиями текущей поверхности, следовательно, генерируемые поверхности также будут периодическими (т.е. идеально сшиваться на границах). У генератора поверхности есть следующие параметры:

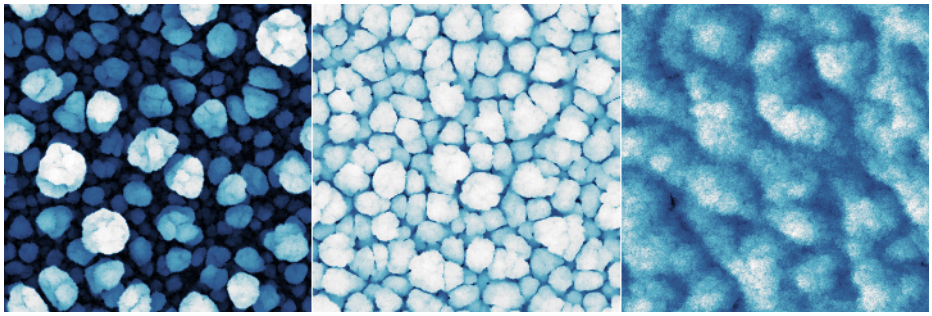
Покрытие Среднее число частиц, генерируемых над каждым пикселем поверхности.

Высота Увеличение локальной высоты при прилипании частицы к поверхности. Поскольку горизонтальный размер частицы всегда один пиксель, высота измеряется в пикселях. Высота в один пиксель подразумевает кубические частицы, пока рассмотрение касается процесса роста. С точки зрения детекции столкновений частицы считаются бесконечно малыми.

Наклон Центральный угол наклона, с которым генерируются частицы (угол падения). Нулевое значение обозначает, что малые углы падения имеют наивысшую вероятность. Большие значения означают, что частицы более вероятно упадут с большего угла, чем с меньшего. Но для большого разброса направлений, распределение остаётся изотропным в горизонтальной плоскости.

Направление Центральное направление в горизонтальной плоскости, с которым генерируются частицы. Большой разброс означает изотропное распределение в горизонтальной плоскости; для малых дисперсий рост анизотропен.

Релаксация Метод определения пикселя, к которому в конечном итоге прилипнет частица. На данный момент доступны два варианта. При слабой релаксации рассматриваются только два пикселя: непосредственно перед столкновением и после него, частица прилипает к более низкому из них. В случае сильной релаксации дополнительно рассматривается локальная область 3×3 пикселя. Частица может переместиться к более низкому соседнему пикселю с определённой вероятностью перед тем, как прилипнет насовсем к поверхности.



Искусственные колоннообразные поверхности: свободная упаковка колонн (слева), плотная упаковка колонн (по центру), направленный рост при сильной релаксации (справа).

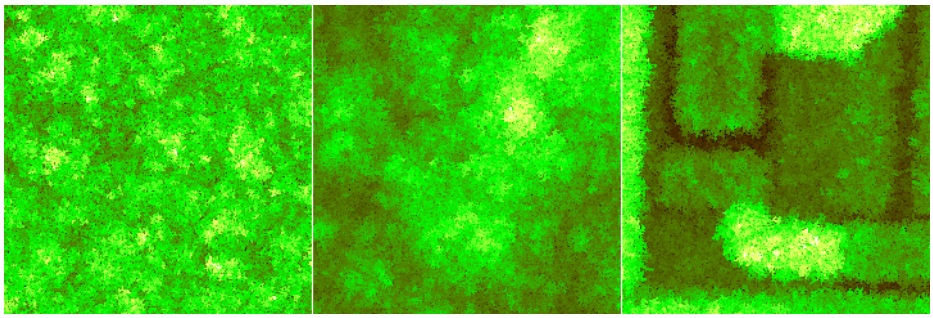
Баллистическое осаждение

Вертикальное баллистическое осаждение это одна из простейших фундаментальных моделей роста плёнок. Частицы падают вертикально в произвольно выбранное место (пиксель). Высота этого места увеличивается на высоту частицы. Однако, если новая высота окажется меньше высоты любого из четырёх соседних мест, частица считается прилипшей к соседней колонне. Таким образом, высота точки падения становится равной максимальной из окружающих высот. Это является единственным механизмом, вводящим корреляции в горизонтальной плоскости в результирующую шероховатость.

Расчёт имеет всего несколько параметров:

Покрытие Среднее число частиц, генерируемых над каждым пикселем поверхности.

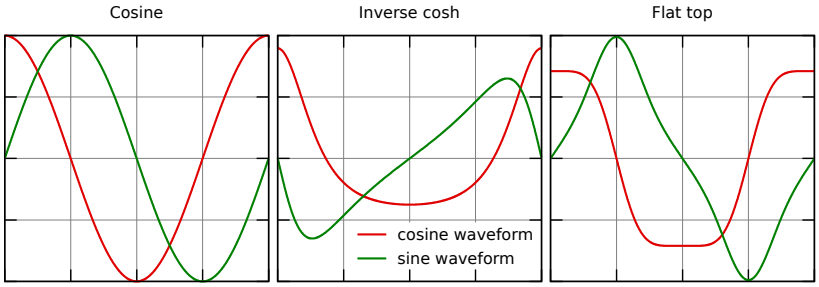
Высота Увеличение локальной высоты, которое происходит при падении частицы на пиксель.



Искусственные поверхности, созданные баллистическим осаждением: начальная фаза с достаточно малой длиной корреляции (слева); после того, как корреляции достигли размера изображения (по центру); осаждение, начатое с высоты поверхности микросхемы (справа).

Волны

Метод волнового синтеза генерирует изображение на основе интерференции волн от набора точечных источников. Помимо обычной косинусоидальной волны, доступны несколько других форм волны, каждая из которых имеет чётный и нечётный вариант, различающиеся на сдвиг фазы $\pi/2$ во всех частотных компонентах. Когда волна рассматривается как комплексная, чётная часть (косинусоида) образует действительную часть, а нечётная (синусоида) образует мнимую.



Чётные и нечётные формы волны для различных доступных видов волн. Для изображений смещения используются только косинусоидальные формы; полная комплексная волна используется для генерации изображений интенсивности и фазы.

Для генератора доступны нижеследующие опции:

Величина Величина для показа на изображении. Смещение это сумма действительных частей. Амплитуда это модуль комплексной волны. Фаза это фазовый угол комплексной волны.

Число волн Число точечных источников, от которых распространяются волны.

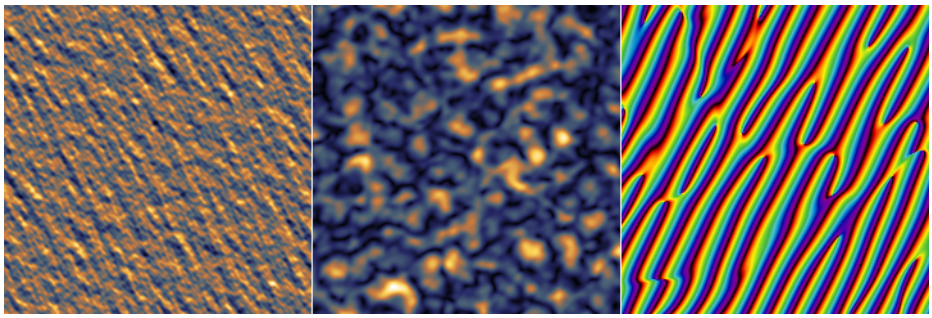
Форма волны Одна из описанных выше форм волны.

Амплитуда Приблизительная амплитуда высот (среднеквадратичное отклонение) генерируемого изображения. Следует отметить, что она отличается от от амплитуды отдельных волн: амплитуда высот в сгенерированном изображении должна расти пропорционально квадратному корню из числа волн в этом случае, в то время как она фактически остаётся почти постоянной пока не меняется амплитуда.

Частота Пространственная частота волн. Измеряется относительно размера изображение, т.е. значение 1.0 означает длину волны, равную размеру стороны изображения.

X центра, Y центра Координаты точечных источников. Нуль соответствует центру изображения. Координаты измеряются в размерах изображения. В общем случае, хотя бы один из соответствующих разбросов должен быть ненулевым, иначе все точечные источники будут совпадать (хотя можно сгенерировать некоторые интересные текстуры варьируя частоты).

Затухание Затухание определяет как быстро волны ослабляются. Значение измеряется в обратных длинах волн и задаётся как десятичный логарифм, что показывается единицами измерения $\log_{10}$.



Искуственные волнистые поверхности: карта смещений сгенерированная с достаточно большим разбросом частот (слева); изображение амплитуды для волны в форме обратного cosh (по центру); изображение фазы для малого кластера далёких источников (справа).

Домены

Расчёт реализует гибридную неравновесную модель Изинга [2], совмещающую дискретную модель Изинга для малых расстояний с непрерывным медленным ингибитором.

Дискретная переменная u имеет два возможных значения, которые она меняет с вероятностью

$$p = \min\left\{\frac{1}{2}\exp(-\Delta E/T), 1\right\}$$

где ΔE – изменение энергии в результате смены состояния и T – температура. Энергия задаётся числом соседей в противоположном состоянии в направлениях вдоль координатных осей n_o, числом соседей в противоположном состоянии в направлении по диагоналям n_d и также смещением, вызванным полем ингибитора v:

$$E = n_\mathrm{o} + \frac{1}{2}n_\mathrm{d} + Buv$$

Непрерывное поле ингибитора v задано локальным дифференциальным уравнением, связанным с переменной u:

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = -v - \nu + \mu u$$

где μ – связь ингибитора и ν – параметр смещения. Граничные условия для расчёта периодические, следовательно, генерируемые изображения также будут периодическими (т.е. идеально совмещаться друг с другом на границе).

Расчёт управляется следующими параметрами:

Число шагов Одна итерация расчёта состоит из четырёх шагов: обновление u методом Монте-Карло, шаг по времени в решении дифференциального уравнения для v, другой шаг Монте-Карло и ещё один шаг по времени в дифференциальном уравнении. Показываемые значения v соответствуют второму обновлению. Значение, показываемое как u это среднее из двух значений, наиболее близких по времени к соответствующему значению v. Таким образом, изображения u трёхзначные, а не двузначные.

Температура T Температура определяет вероятность, с которой переменная с двумя состояниями u может переходить из одного в другое с энергией большей или равной (смена состояния, которая сильно понижает энергию, происходит сама по себе). Большая температура означает меньшее разделение между двумя доменами u.

Сила ингибитора B Сила, с которой непрерывная переменная смещает энергию в каждом пикселе. Для больших значений ингибитор играет большую роль по сравнению с поверхностным натяжением.

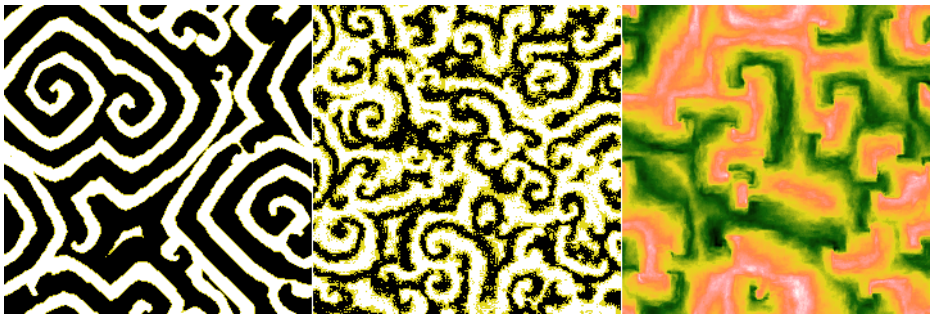
Связь ингибитора μ Фактор связи между u и v в дифференциальном уравнении для v.

Смещение ν Смещение в дифференциальном уравнении для v в сторону больших или меньших значений.

Временной шаг метода Монте-Карло Временной шаг в дифференциальном уравнении, соответствующий одному шагу в методе Монте-Карло. Таким образом, этот параметр определяет относительную скорость двух этих процессов.

Высота Диапазон значений создаваемых изображений.

Вкладка Предустановки содержит несколько загружаемых наборов параметров, которые генерируют интересные структуры. Можно выбрать набор предустановок и нажать Загрузить выбранные предустановки чтобы загрузить набор параметров для данного генератора. Начальное число для генератора случайных чисел не является частью предустановок. Следовательно, для каждого начального числа получаемые изображения будут всё ещё варьироваться, но будут сохранять одинаковый общий облик (несколько зависит от удачи экспериментатора, некоторые случайные значения генерируют менее интересные изображения по сравнению с другими).



Искусственные доменные поверхности: спиральные волны с дальним порядком (слева); упорядоченные спиральные волны с близким порядком при большей температуре (по центру); непрерывное изменение при ситуации низкой температуры с малой силой и связью (справа).

Отжиг

Модуль реализует простую модель клеточного автомата описывающего разделение фаз с помощью отжига не смешивающегося решеточного газа, состоящего из двух компонент A и C. Рассматривается только взаимодействие между ближайшими соседями. Различие в энергиях образования

$$\Delta E(\mathrm{AC}) = 2E_{\mathrm{f}}(\mathrm{AC}) - E_{\mathrm{f}}(\mathrm{AA}) - E_{\mathrm{f}}(\mathrm{CC}) \geq 0$$

определяет предпочтение в разделении фаз. Отжиг происходит путём обмена местами двух соседних ячеек (пикселей). релаксация всегда происходит в сторону более энергетически выгодного расположения, однако они также могут переключаться в сторону менее выгодного с вероятностью, задаваемой температурой T

$$\exp\left(-\frac{\Delta E}{k_{\mathrm{B}}T}\right)$$

Поскольку вероятность зависит только от соотношения компонент, можно задать постоянную Больцмана равной единице и тогда модель зависит только от безразмерной температуры и относительного соотношения двух компонент.

Расчёт управляется следующими параметрами:

Число шагов Одна итерация соответствует тому, что каждая пара расположений в соседних ячейках однократно проверяется на возможность замены. Однако, это сохраняется только в вероятностном смысле. Некоторые расположения могут быть проверены несколько раз в течение одной итерации, другие ни разу.

Начальная температура Безразмерная температура определяет вероятность с которой ячейки могут меняться в сторону менее энергетически выгодной конфигурации, как описано выше. Начальная температура это температура при которой начинается отжиг.

Конечная температура Безразмерная температура при которой моделирование завершается.

Доля компонента Доля компонента C в смеси A-C.

Высота Диапазон значений создаваемых изображений.

Число шагов усреднения Выводимое изображение может захватывать только финальное состояние или оно может быть расчитано усреднением определенного числа состояний до конечного, задаваемого этим параметром.

Опционально может быть задействована трёхкомпонентная модель. Третий компонент B ведёт себя подобно A и C. Однако, модель в этом случае будет содержать больше параметров:

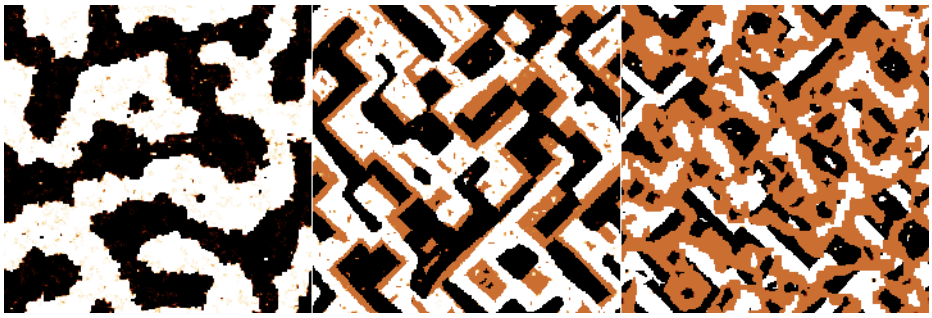
Доля компонента B Доля компонента B в смеси. Остаток будет поделен между A и C в соответствии с Долей компонента.

Энергия смешивания AB Разница в энергиях формирования для компонент A и B по отношению к максимальному значению.

Энергия смешивания AC Разница в энергиях формирования для компонент A и C по отношению к максимальному значению.

Энергия смешивания BC Разница в энергиях формирования для компонент B и C по отношению к максимальному значению.

Для того, чтобы безразмерная температура масштабировалась одинаково с двухкомпонентной моделью, наибольшая энергия смешивания всегда нормируется к 1. Если вы пытаетесь её уменьшить, две другие энергии смешивания увеличиваются вместо неё, сохраняя соотношение, до тех пор, пока одна из них не достигнет значения 1. Тогда эта разница энергий станет наибольшей и наибольшая до этого может уменьшаться дальше.



Искусственные изображения отжига созданные для двухкомпонентной модели и двух различных вариантов настроек трёхкомпонентной модели.

Связанные уравнения в частных производных

Большое число интересных текстур может создаваться с помощью численного решения связанных нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных в плоскости изображения. В настоящее время модуль реализует два генератора с общими основными параметрами:

Число шагов Число шагов по времени для решения связанных дифференциальных уравнений в частных производных. Решение практически перестаёт меняться после определенного числа итераций, которое, однако, очень сильно варьируется в зависимости от типа текстуры и её параметров.

Шаблон Тьюринга

Генератор текстуры Тьюринга может генерировать одиночную классическую текстуру в относительно управляемом режиме. Он имеет следующие параметры:

Размер Характеристические ширины полос в текстуре.

Степень хаоса Специальный параметр, управляющий сходимостью решения. Малые значения приводят к более упорядоченным текстурам. Однако, решение может сходиться очень долго для больших раземеров изображения. Большие значения приводят к более возмущенным текстурам, однако, гораздо быстрее.

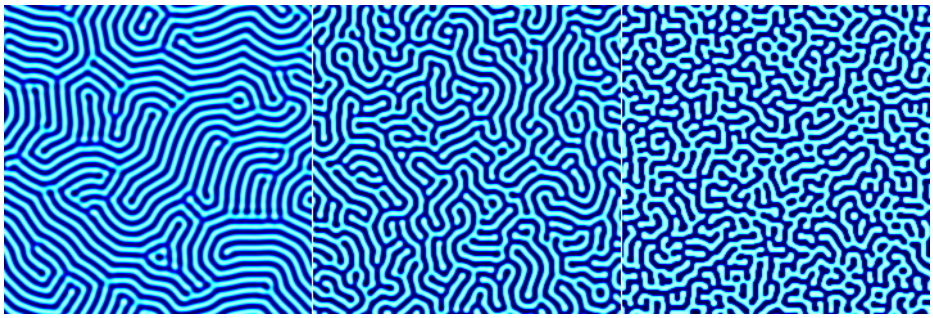
Текстура генерируется двухкомпонентной моделью диффузия-реакция, с уравнениями для обоих компонентов в форме

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = p\Delta c_1 + qc_2 + rf(c_1)$$

В уравнении для второго компонента роли просто меняются (и отличаются константы). Функция f определяется как

$$f(x) = x\left[\frac{100}{100+x^2} - \frac{1}{100}\right]$$

Константы p, q и r не управляются напрямую. Они (и шаг по времени) рассчитываются из размера и степени хаотичности в соответствии с калибровочной формулой.



Три текстуры Тьюринга с одной и той же характеристической шириной полосы и степенью хаоса увеличивающейся слева направо.

Диффузия-реакция

Модель диффузии-реакции может генерировать большое разнообразие текстур. Однако, прямая настройка скоростей реакции и параметров, таких как размер особенностей, невозможна. Модуль содержит следующие параметры:

Тип вывода Какой из двух компонент будет отрисовываться на изображении.

Скорость удаления Константа скорости реакции, относящаяся к удалению материала.

Скорость питания Константа скорости притока (питания) материала в реакции.

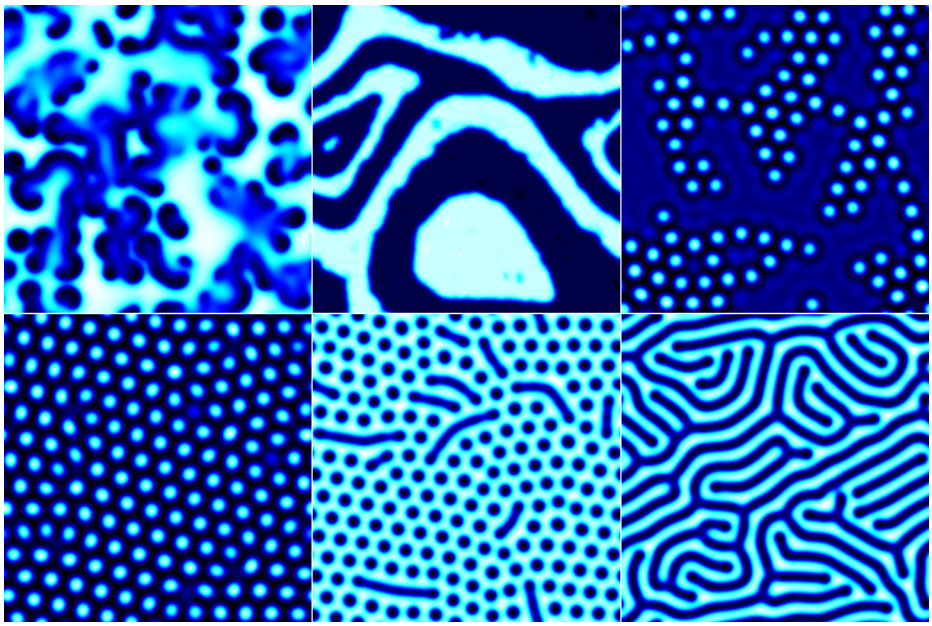
Плотность источника Плотность на пиксель фиксированных источников с высоким/низким значениями. Плотность рассчитывается на пиксель, множитель 10^{-3} не используется.

Количество итераций без источника Как много итераций в конце будет проводиться после того, как источники будут убраны. Можно задать значение больше, чем общее количество итераций, но это не очень полезно (при таком задании источники будут убраны с самого начала).

В большей части диапазонов параметров реакции требуется источник реагентов чтобы получались интересные текстуры. Без такого источника состояние системы развивается в постоянное плоское изображение или нестабильность в формате шахматной доски. Одной из возможностей стимулирования генерации интересных текстур (часто используемой в демонстрациях) является большая пространственная неоднородность констант реакции в области протекания. Однако, это не позволяет рассчитывать заданные специфичные текстуры для определенных наборов параметров.

Тогда, вместо этого, модуль добавляет явно заданные источники. Они реализованы в грубой форме как случайные пиксели, которые сохраняют свои низкие/высокие значения (и иногда их можно наблюдать в анимации эволюции). На них не действует реакция, но они влияют на своих ближайших соседей.

Некоторые текстуры будут стабильны после того, как они сформировались, и при удалении источников ничего не происходит. Некоторые нет и вырождаются в одно из неинтересных состояний. Немного разные наборы текстур могут быть получены при удалении источников на длительное время и при удалении источников ненадолго в конце. Кроме того, есть несколько интересных переходных текстур.



Примеры текстур, которые могут быть получены с помощью модели диффузии-реакции.

Диффузия

Модуль моделирования реализует дискретную модель диффузии с ограниченной агрегацией на основе метода Монте-Карло. Частицы в форме пикселей падают на поверхность и движутся вдоль неё пока не прилипают к кластеру, постепенно образуя монослой. Поток падающих частиц невелик, поэтому в каждый момент времени свободно двигается малое число частиц и частица может пройти заметное расстояние по поверхности до момента прилипания. Для типичных значений параметров это приводит к образованию кластеров в форме «фрактальной снежинки».

Расчёт управляется следующими параметрами:

Покрытие Среднее количество раз, когда частица попадает на заданный пиксель изображения. Значение покрытия 1 означает что поверхность будет покрыта монослоем, предполагая, что частицы покрывают её равномерно.

Поток Среднее число частиц, падающих на каждый заданный пиксель за один шаг моделирования. Меньшие значения потока приводят к более крупным структурам, поскольку частицы участвуют в диффузии более продолжительное время до встречи с другой частицей. Значение задано как десятичный логарифм, что показывается единицами измерения $\log_{10}$.

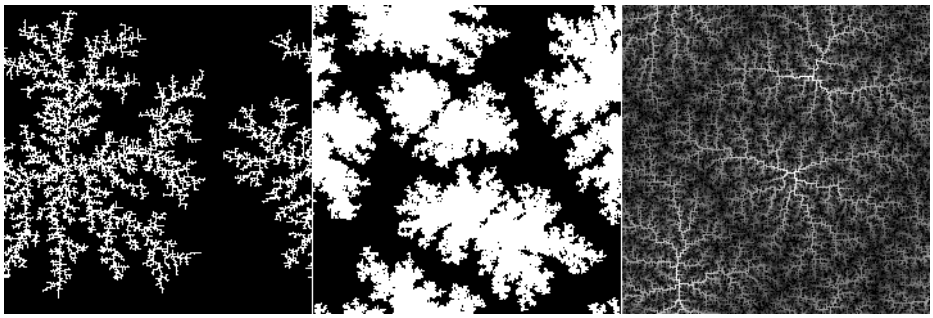
Высота Высота отдельной частицы которая задаёт высоту ступеней в получаемом изображении.

Вероятность прилипания Вероятность того, что свободная частица окончательно прилипнет и перестанет двигаться, когда она касается другой отдельной частицы. Вероятности что частица прилипнет, если она коснётся двух или трёх частиц возрастает пропорционально в зависимости от этого значения. Вероятность прилипания всегда нулевая для частицы без соседей и всегда единица для частицы, окруженной четырьмя соседними.

Вероятность активации Вероятность для частицы, которая не прилипла что она сдвинется если она касается другой частицы. Вероятность для большего числа касающихся частиц уменьшается как степень вероятности для отдельной частицы. Частицы без соседей могут двигаться свободно всегда.

Вероятность прохождения Швёбеля Частица, которая упала на верхушку уже сформированного кластера может иметь сниженную вероятность спуститься на более низкий уровень из-за так называемого барьера Швёбеля. Если этот параметр равен 1, барьера нет, т.е. частицы могут свободно спускаться. Наоборот, вероятность, равная 0, означает что частицы никогда не спустятся на более низкие уровни. Значение задано как десятичный логарифм, что показывается единицами измерения $\log_{10}$.

Следует отметить, что некоторые комбинации параметров, а именно очень маленький поток и очень низкая вероятность преодолеть барьер Швёбеля, могут привести к очень долгим временам моделирования.



Искусственные дифузионные поверхности: редкие кластеры с высокой вероятностью прилипания (слева); частые кластеры с низкой вероятностью прилипания (по центру); многослойные фрактальные структуры с высоким барьером Швёбеля (справа).

Волокна

Метод синтеза поверхности, основанный на случайном размещении волокон сильно похож на метод синтеза Объекты, за исключением того, что вместо объектов ограниченного размера он добавляет бесконечно длинные (в принципе) волокна на поверхность.

Генератор имеет небольшой набор параметров, поделенных между вкладками Генератор и Размещение. Первая группа содержит основные настройки и параметры, определяющие профили отдельных волокон:

Форма Форма профиля поперёк волокна. Опции Полукруг, Треугольник, Прямоугольник и Парабола не требуют пояснений. Форма Квадратичный сплайн соответствует кусочной квадратичной функции, состоящей из трёх частей, которая является базисной функцией квадратичного B-сплайна.

Покрытие Среднее количество волокон перекрывающих один пиксель изображения. Значение покрытия 1 означает что поверхность будет ровно один раз покрыта волокнами, при этом они будут покрывать её равномерно и не будут пересекаться. Большие значения означают больше слоёв объектов и более медленную генерацию изображения. Значение является приблизительным и действительное покрытие немного зависит от других параметров.

Ширина Ширина волокна в пикселях. Также имеет обычную связанную опцию Разброс, которая определяет различия между отдельными волокнами. Однако, для волокон ширина также может меняться вдоль каждого отдельного волокна. Это настраивается опцией Вдоль волокна. Высокие значения разброса вдоль волокна могут в сочетаниях с некоторыми другими опциями (в частности, высокими значениями деформации по длине и высокими значениями разброса толщины) приводить к странно выглядящим изображениям и возможным артефактам.

Высота Величина, пропорциональная высоте волокна, обычно высота наивысшей точки. Также как и Ширина, она имеет два разброса, между отдельными волокнами и вдоль каждого индивидуального волокна.

Выбор опции Масштабируется с шириной заставляет невозмущённые высоты масштабироваться пропорционально ширине волокна. В противном случае высота не зависит от размера.

Кнопка как у текущего изображения устанавливает значение высоты равным значению, основанном на среднеквадратичном отклонении текущего изображения.

Усечение Волокна могут быть усечены на определённой высоте для создания профилей в форме усечённых полукругов, парабол, и т.п. Высота усечения задаётся в долях от общей высоты объекта. Единица означает неусечённую фигуру, ноль – полное удаление волокна.

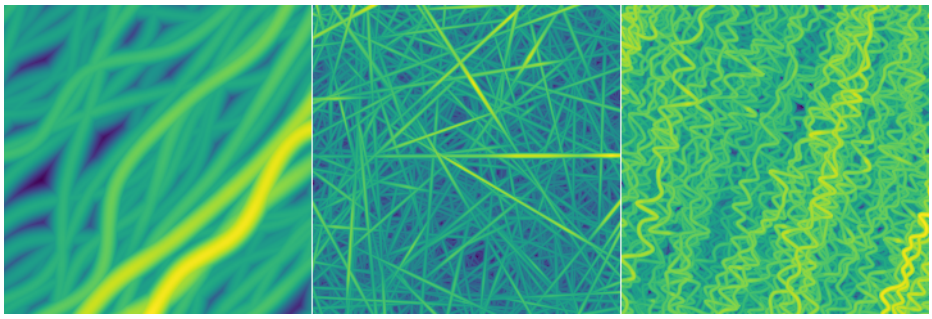
Вторая группа содержит опции, управляющие тем, как волокна деформируются и добавляются к изображению:

Ориентация Поворот волокон, измеренный против часовой стрелки. Ноль соответствует ориентации слева направо.

Плотность Плотность управляет тем, как часто волокно деформируется по его длине. Низкая плотность соответствует постепенной деформации на больших масштабах, в то время, как высокая плотность означает что волокно деформируется часто, что приводит к волнистым и извилистым формам.

Горизонтальный масштаб Как сильно волокно деформировано в направлении, перпендикулярном его основному направлению. Увеличение этого значения делает волокно извилистым, правда в относительно правильной форме.

По длине Как сильно точки волокна смещаются вдоль его длины. Увеличение этого параметра вызывает появление неправильных перекручиваний и петель (или даже узлов).



Искусственные волокнистые поверхности: умеренно искривленные волокна, все ориентированные в более или менее одном направлении (слева); много слоёв тонких прямых случайно ориентированных волокон (по центру); параллельные волокна с высокой плотностью горизонтальных деформаций (справа).

Решетка

Модуль синтеза решеток создаёт поверхности основанные на случайных двумерных решетках. Он содержит две основные части. В первой, управляемой параметрами во вкладке Решетка, создаётся набор точек в плоскости, которые организованы в более или менее случайную решетку. Вторая часть, управляемая параметрами во вкладке Поверхность, создаёт реальную поверхность, основанную на величинах, рассчитанных в ходе тесселяции Вороного и /или триангуляции Делоне для заданного набора точек.

Создание решетки управляется следующими параметрами:

Решетка Основной тип решетки. Случайная решетка соответствует полностью случайно расположенным точкам. Другие типы соответствуют правильному расположению точек (квадратному, гексагональному, треугольному), хорошо известным мозаичным заполнениям (каирской, плосконосой квадратной, Пенроуза) или восстановлениям поверхности (кремний 7×7).

Размер Средний размер ячейки. Точнее, этот параметр описывает среднюю плотность точек. Он равен стороне квадрата, если такое же число точек организовано в квадратную решетку.

Релаксация решетки Величина, на которую решетке можно релаксировать. Процесс релаксации отталкивает точки от очень близких соседей в сторону большой пустой области. В целом это приводит к тому, что размеры ячеек становятся более равномерными. Естественно, процесс релаксации не влияет на правильные решетки. Следует отметить, что релаксация требует прогрессивной ретесселяции и большой параметр релаксации может существенно замедлить генерацию поверхности.

Релаксация высоты Величина, на которую могут релаксировать случайные значения, присвоенные каждой точке (см. ниже). Процесс релаксации похож на диффузию и приводит к общему сглаживанию случайных значений.

Ориентация Поворот решетки по отношению к определённому исходному направлению, измеренный против часовой стрелки. Доступно только для правильных сеток, поскольку случайная сетка является изотропной.

Амплитуда, Горизонтальный масштаб Параметры, управляющие деформацией решетки. Имеют то же значение, что и в синтезе структур.

Финальная поверхность строится как взвешенная сумма набора основных величин, полученных в результате тесселяции Вороного или триангуляции Делоне. Каждая величина может быть включена или выключена. Если она выбрана в списке, её вес добавляется к сумме и её пороговые параметры можно модифицировать двигая ползунки. Нижний и верхний порог ограничивают диапазон значений (который всегда нормализован до $[0, 1]$) меняя все величины выше верхнего порога на величину порога и аналогично для нижнего.

Некоторые из основных величин рассчитываются только из горизонтальных координат. Некоторые, однако, рассчитываются из случайных значений («высот»), присвоенных каждой точке множества. Доступные величины включают в себя:

Случайная постоянная Округляющая интерполяция между случайными величинами, присвоенными каждой точке множества. Это означает, что каждая ячейка Вороного заполнена постоянной случайной величиной.

Случаная линейная Линейная интерполяция между случайными величинами, присвоенными каждой точке множества. Следовательно, поверхность является непрерывной и каждому треугольнику Делоне соответствует грань поверхности.

Случайная выпуклая Интерполяция похожа на предыдущую, но является нелинейной, создавая относительно ровные области вокруг каждой точки множества.

Радиальное расстояние Расстояние до ближайшей точки множества.

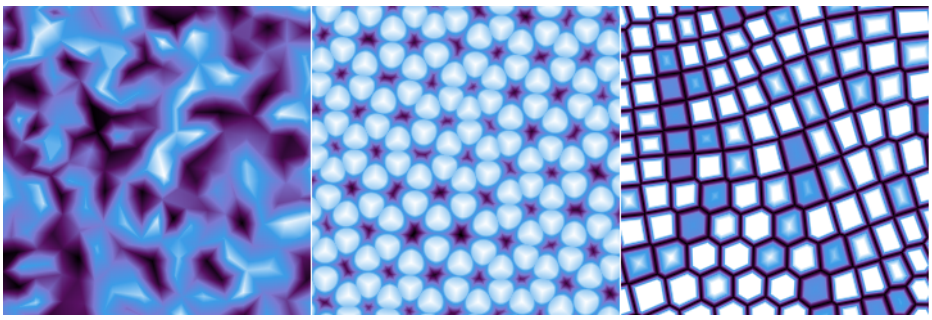
Сегментированное расстояние Расстояние до ближайшей границы ячейки Вороного, масштабированное в каждом сегменте ячейки таким образом, чтобы точка множества была равноудалена от всех границ.

Сегментированное случайное Та же величина, что и сегментированное расстояние, но умноженная на случайное значение, присвоенное точке множества.

Расстояние до границы Расстояние до ближайшей границы ячейки Вороного.

Случайное до границы Та же величина, что и расстояние до границы, но умноженная на случайную величину, присвоенную точке множества.

Расстояние до второго ближайшего Расстояние до второй ближайшей точки множества.



Искусственные решетчатые поверхности: граненная поверхность, создаваемая случайной линейной интерполяцией (слева); бугры на искаженной треугольной текстуре (по центру); искаженная прямоугольная текстура с сегментами, разделёнными бороздами (справа).

Броуновский

Этот модуль генерирует, помимо других вещей, поверхности с профилями, подобными дробному броуновскому движению. Метод создания, однако, не очень сложен. Начиная от углов изображения, внутренние точки рекурсивно линейно интерполируются вдоль горизонтальной и вертикальной осей, добавляя шум, который масштабируется с расстоянием согласно заданной экспоненте Хёрста. Некоторые из поверхностей окажутся такими же, как генерирует спектральный синтез, однако, создание их в линейном пространстве, а не в пространстве частот, позволяет менять их различные свойства.

Генератор настраивается нижеследующими параметрами:

Экспонента Хёрста Экспонента Хёрста H. Для нормальных значений между 0 и 1, квадратный корень из функции корреляции высота-высота растёт как H-тая степень расстояния. Алгоритм создания позволяет использовать даже отрицательные значения, поскольку он останавливается при конечном разрешении в один пиксель.

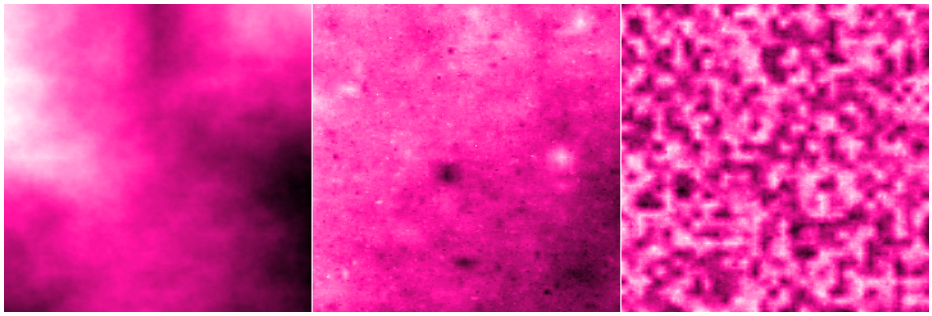
Масштаб стационарности Масштаб, на котором принудительно реализуется стационарность (следует заметить, что дробное броуновское движение не является стационарным). Когда этот масштаб сравним с размером изображения или больше, он оказывает немного влияния. Однако, когда он мал, изображение становится «усреднённым» вместо самоподобия выше этого масштаба.

Распределение Распределение шума, добавленного при генерации. Равномерный и гауссов приводят в общем случае к одинаковым поверхностям (статистически); первый, однако, является более быстрым. Более тяжелые в хвосте распределения, т.е. экспоненциальное и особенно степенное, приводят к ярко выраженным пикам и впадинам.

Степень Степень α степенного распределения. Функция плотности вероятности пропорциональна

$$\frac{\alpha/2}{(|z|+1)^{\alpha+1}}$$

Ср. квадр. Среднеквадратичное значение высот (или отличий от средней плоскости, которая, однако, всегда является плоскостью $z = 0$). Следует отметить, что это значение применяется к данному генерируемому изображению, не процессу как таковому, который не имеет конечного среднеквадратичного отклонения. Кнопка Как у текущего изображения устанавливает значение среднеквадратичного отклонения равным ему же для текущего изображения.



Искусственные броуновские поверхности: классическая поверхность, созданная с H порядка 0,7 (слева); похожее на туманность изображение, сгенерированное с помощью степенного распределения с большой интенсивностью в хвосте (по центру); влияние малого масштаба стационарности (справа).

Фазы

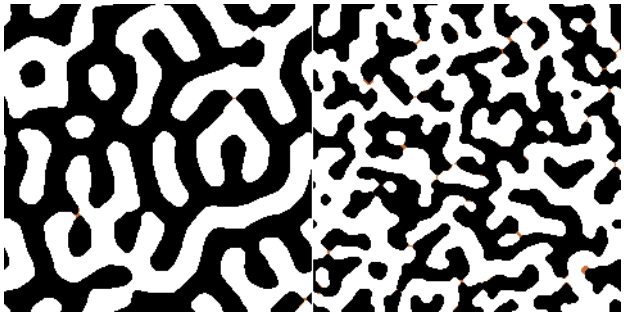
Модуль создаёт данные несколько напоминающие структуру магнитных доменов, изучаемых магнитно-силовой микроскопией (МСМ) или структуру полимеров в органических солнечных батареях, изучаемую каким-либо видом контрастирования состава (ИК, КР, силовые кривые). В отличие от более физически правильных, но требующих больших вычислительных ресурсов подходов, данный работает на основе спектрального синтеза поверхности с ограниченным набором пространственных частот и последующем применении морфологических операций для получения изображений двух фаз. Выходное изображение в данном методе в основном состоит из двух значений, соответствующих двум фазам, хотя иногда может появляться промежуточное «переходное» значение.

Генератор настраивается нижеследующими параметрами:

Размер Типичная ширина полосы.

Разброс размеров Разброс размеров (или. точнее, пространственных частот). Малый разброс означает гладкие правильные элементы структуры. Однако, для очень малых значений разброса на изображении могут появиться предпочтительные направления (и оно станет анизотропным) вследствие исчерпания набора допустимых пространственных частот. Большой разброс означает менее правильные границы раздела фаз и большее количество переходных областей.

Высота Различие в значениях соответствующих двум различным фазам, определяет общий масштаб изображения по z.



Искусственные изображения двух фаз: малый разброс размеров (слева); больший разброс размеров (справа).

Диски

Модуль создаёт данные, состоящие из непересекающихся дисков, возможно постобработанных таким образом, чтобы образовать поверхность, покрытую черепицей (мозаичной текстурой). Подобного результата можно также

достичь используя синтез Объектов если включена опция Избегать наложения. Однако, в данном случае, только несколько затравочных дисков расположены случайным образом, остальные всегда помещаются в центр самого большого оставшегося пустого пространства. Это приводит к более равномерному распределению размеров. Более того, преобразование в черепицу создаёт структуру, где обычно три объекта встречаются под углами близкими к 120 градусам, подобно пенистым структурам.

Генератор настраивается нижеследующими параметрами:

Начальный радиус Радиус диска-затравки, случайно размещаемого в начале.

Минимальный радиус Минимально допустимый радиус всех остальных дисков. Когда не остаётся места для диска хотя бы такого размера, генерация останавливается.

Зазор Дополнительный отступ от соседних дисков. В то время, как Минимальный радиус задаёт минимальный размер действительно размещаемых дисков, этот параметр увеличивает минимальный размер свободного пространства, куда можно поместить диск.

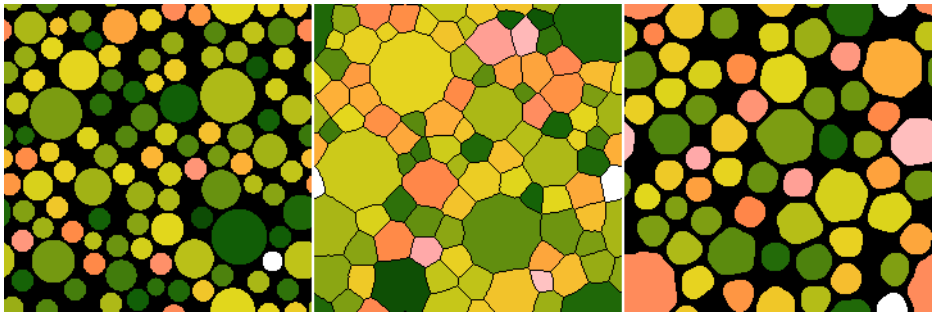
Преобразовать в мозаику Если включено, все диски расширяются до того момента, как они начнут касаться своих соседей. Поверхность становится мозаичной, с тонкими зазорами между отдельными фрагментами.

Толщина зазора Ширина зазора между элементами мозаики после преобразования.

Применить фильтр размыкания Если включено, мозаичное покрытие затем подвергается обработке фильтра размыкания заданного размера. Этот процесс убирает слишком маленькие детали и делает оставшиеся более округлыми.

Размер Размер фильтра размыкания.

Высота Высота дисков или мозаики по отношению к базовому уровню, определяет общий масштаб оси z изображения. Высоты отдельных особенностей будут распределены вокруг этого значения когда параметр Разброс ненулевой.



Изображения искусственных дисков: круглые диски с некоторым распределением высоты (слева); преобразование в мозаику (по центру); эрозия фильтром размыкания (справа).

Дюны

Модуль основан на простом моделировании формирования ветровых дюн [3]. Частицы могут быть подхвачены ветром с определенной вероятностью, перенесены вдоль направления ветра и осесть в новом месте. Функция имеет следующие параметры:

Покрытие Среднее число частиц на единичный пиксель.

Число шагов Одна итерация соответствует тому, что ветер подхватывает одну случайную частицу в каждом пикселе и она осаждается где-то ещё. Однако, пиксели при этом выбираются случайно. Некоторые места могут быть выбраны несколько раз в ходе одной итерации, другие ни разу. Некоторые из выбранных мест могут быть голой скалой-основанием на которой нет песчаных частиц чтобы их подхватить.

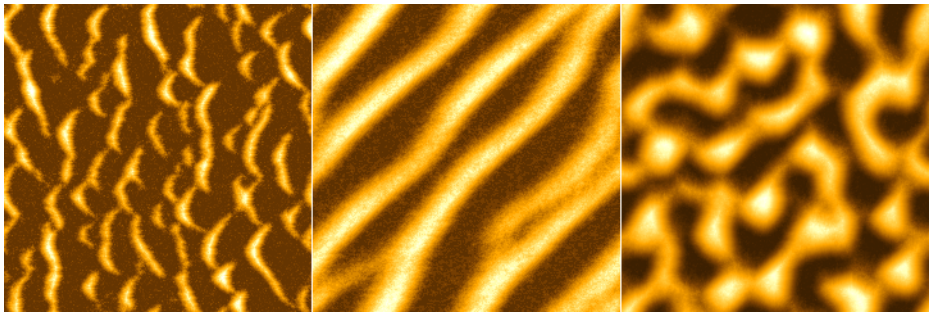
Направление и Разброс Среднее направление ветра и разброс этого направления. Малый разброс соответствует случаю, когда направление ветра постоянно. Большие значения соответствуют более случайному направлению ветра.

Минимальный шаг и Диапазон шагов Песчаная частица может считаться касающейся поверхности временами и переносимой ветром высоко над поверхностью между касаниями. Она может осесть на поверхность когда она касается её. Минимальный шаг это минимальное расстояние (в пикселях) одного такого скачка; диапазон задаёт интервал (снова в пикселях) между минимальной и максимальной длиной прыжка.

Вероятность прилипания на скалах Вероятность частицы осесть на поверхность когда она касается голой скалы.

Вероятность прилипания на песке Вероятность частицы осесть на поверхность когда она касается поверхности и там уже есть некоторое количество песка. Эта вероятность в общем случае должна быть выше, чем для голой скалы.

Максимальный уклон Когда осаждение частицы (или подхватывание её ветром) создаёт слишком большую разницу высоты между соседними пикселями песок становится нестабильным. Он после этого сползает вниз чтобы либо уменьшить высоту холма, либо заполнить впадины пока максимальный уклон нигде не будет превышен.



Изображения дюн: с настройками по умолчанию (слева); длинные плоские дюны с небольшим максимальным уклоном (по центру); более изотропные дюны для направления ветра с высокой случайностью (справа).

Плато

Поверхность создается наложением хлопьев или плато поверх друг друга, начиная с наибольшего и двигаясь к меньшему в соответствии с законом масштабирования. По умолчанию они не пересекаются, но можно включить режим наложения хлопьев (немного похоже на то, как происходит с одномерными материалами по типу графена). Генератор использует следующий набор параметров:

Максимальный размер Приблизительный максимальный радиус плато.

Минимальный размер Приблизительный минимальный радиус плато.

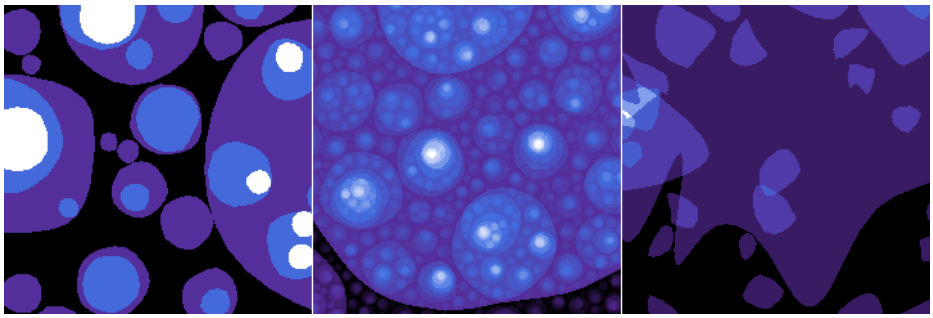
Степенной закон размера Насколько быстро радиус плато уменьшается с увеличением количества уже помещенных плато. Большие значения означают то, что размер быстро убывает и плато имеют тенденцию быть редкими и изолированными. Малые значения означают что размер убывает медленно и плато имеют тенденцию быть плотными и складываться в высокие структуры.

Внимание Может быть сложно, или даже невозможно, найти положения всех плато с заданным максимальным и минимальным размером и степенью масштабирования. Низкие степени полезны только с узкими диапазонами размеров. В противном случае генератор поверхности будет очень медленным или вообще никогда не закончит работать.

Неправильность формы Насколько сильно формы могут отклоняться от симметричных дисков.

Степень пересечения Приблизительная доля плато, которые будут пересекаться с другими плато.

Масштабируется со степенью размера Степень, с которой высота плато масштабируется с его размером. Для заданной по умолчанию степени 0 все плато будут иметь одинаковую высоту (за исключением возможного случайного разброса). Положительные степени означают, что высота уменьшается с уменьшением размера. Отрицательные степени означают, что более маленькие плато будут выше, создавая поверхность с пиками.



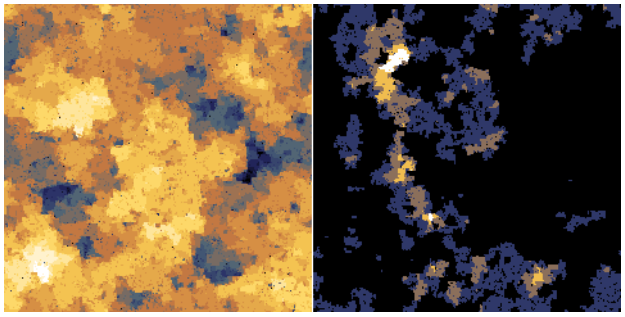
Изображения плато: с настройками по умолчанию (слева); приблизительно самоаффинная поверхность с небольшой степенью масштабирования и минимальным размером (по центру); несколько пересекающиеся хлопья неправильной формы (справа).

Смачивание

Смачивание это простое моделирование движения границы смачивания через случайную среду. Среда представлена сеткой вокселей, где каждый воксель имеет разное сопротивление. Жидкость всегда распространяется через воксель с минимальным сопротивлением. Генератор создает изотропные текстуры с дискретной высотой, соответствующей уровням, до которых дошел фронт смачивания. Генератор имеет следующий набор параметров:

Покрытие Среднее количество раз, которое жидкость проходит через пиксель. Результирующее изображение показывает только наиболее дальние точки, таким образом его среднее значение не связано напрямую с покрытием.

Диффузия Вероятность случайного распространения с соседних вокселей, не связанное с приоритетом основанным на сопротивлении. Следует отметить, что значение является логарифмическим.



Изображения фронта смачивания: типичный результат с умеренным покрытием (слева); начальная стадия распространения (справа).

Ссылки

[1] D. Nečas, P. Klapetek: Synthetic Data in Quantitative Scanning Probe Microscopy. Nanomaterials 11 (2021) 1746 10.3390/nano11071746

[2] L. M. Pismen, M. I. Monine, G. V. Tchernikov: Patterns and localized structures in a hybrid non-equilibrium Ising model. Physica D 199 (2004) 82, doi:10.1016/j.physd.2004.08.006

[3] B. T. Werner: Eolian dunes: Computer simulations and attractor interpretation. Geology 23 (1995) 1107, doi:10.1130/-0091-7613(1995)023<1107:EDCSAA>2.3.CO;2

4.29 Калибровки и погрешности

Данные калибровки

Данные калибровки могут использоваться для исправления измеренных данных или для расчёта погрешностей. В общем случае, данные калибровки могут быть различного типа и различного уровня сложности. В большинстве случаев пользователь получает ошибку вдоль каждой оси, например, используя калиброванный

эталон. Это значение затем можно использовать для коррекции данных. Подобным образом, в основном значение погрешности определяется для каждой оси из сертификата калиброванного эталона и бюджета погрешности измерительного процесса.

В более сложном случае данные калибровки могут быть определены локально. Ошибки сканера не всегда могут быть описаны всего тремя параметрами (по одному на каждую ось) и его погрешность не обязательно будет одинаковой на всём диапазоне. Для точных измерений, следовательно, имеет смысл определить локальные ошибки, а именно локальные погрешности, которые можно использовать в дальнейших расчётах. Под "локальными" мы подразумеваем здесь погрешности, которые относятся к определённому месту во всём объёме, докуда может дойти сканер.

Чтобы получить локальные ошибки и погрешности, можно снова использовать эталон или задействовать более сложный инструмент, например, интерферометр для калибровки сканирующего основания. Это обычно делается в институтах метрологии.

В Gwyddion есть набор инструментов, помогающий обработке локальной погрешности. Первичные данные калибровки, относящиеся к сканирующему основанию, могут быть определены или загружены. Они могут быть присвоены определённым данным измерений СЗМ, создавая тем самым набор калибровок. Это автоматически используется в инструментах и модулях, для которых может быть рассчитано распространение погрешностей для получения погрешности измерения.

Получение данных калибровки

Обработка данных → Калибровка → Трёхмерная калибровка

Данные калибровки можно получить следующими способами:

Модуль Трёхмерные калибровки → Создать... может использоваться для создания простейших первичных данных калибровки, основанных только на погрешностях и ошибках по xyz и пространственной геометрии сканера. Также требуется задать название калибровки. Первичные данные калибровки будут доступны в модулях под этим именем для применения этих данных в СЗМ измерениях.

Используя модуль Калибровка → Получить простую карту ошибок..., можно определить первичные данные калибровки по xyz из набора измерений калибровочной решетки. Здесь требуется несколько измерений калибровочной решетки для различных уровней z сканера. Вместе оно образует несколько сечений полного объема сканера. Предоставив отдельный элемент решетки, номинальный шаг решетки и предполагая, что плоскостность и ортогональность решетки значительно превышают таковые сканирующего основания, мы можем определить первичные данные калибровки на основе корреляции. Следует отметить что этот способ калибровки микроскопа носит весьма приближенный характер и его использование для нужд метрологии весьма ограничено. Однако, он может предоставить большое количество полезной информации о свойствах сканера если более сложный анализ невозможно провести.

Ну и наконец, используя меню Трёхмерная калибровка → Загрузить из файла... можно загрузить любые первичные данные трёхмерной калибровки, определённые внешним устройством, например, набором интерферометров. Данные должны быть текстовым файлом содержащим наборы данных калибровки (x, y, z, x_err, y_err, z_err, x_unc, y_unc, z_unc).

Применение данных калибровки и дальнейшее использование

Обработка данных → Калибровка → Трёхмерная калибровка

Первичные данные калибровки, полученные на предыдущих шагах, относятся к сканирующему основанию, не к конкретным измерениям СЗМ. Можно использовать данные первичной калибровки для различных измерений. Для использования первичных данных калибровки для обработки измеренных данных, нужно их сперва применить к данным. Используя модуль Калибровка → Применить к данным... можно просматривать и выбирать данные калибровки, которые применяются к измерениям полей высот. После применения калибровочных данных создаётся набор калибровочных полей данных и присоединяется к выбранным данным. В окне просмотра данных появляется символ 'C', который показывает наличие калибровки для данных. Следует отметить, что калибровка присоединённая к результату измерения СЗМ, больше не связана с первичными данными калибровки (использованными для её создания).

Когда к данным привязана калибровка, модули и инструменты чтения данных и расчёта статистических функций находят её автоматически. Погрешность измерений при этом добавляется к результатам измерений. Погрешность рассчитывается используя правило распространения погрешности.

4.30 Скриптовый интерфейс на Python »»

Скриптовый интерфейс на Python позволяет автоматизировать задачи обработки данных СЗМ, как внутри Gwyddion, так и при использовании его функциональности в отдельных программах на Python, которые запускаются отдельно от него. Эти программы могут варьироваться от последовательного выполнения нескольких команд как в макросах, до достаточно сложных программ, собирающих данные из нескольких файлов, обрабатывающих их и использующих сторонние библиотеки и программы.

Модуль Gwyddion, предоставляющий данную функциональность называется pygwy, это название также обобщённо используется для обозначения написания скриптов Python для работы с Gwyddion в целом, даже если оно непосредственно не связано с модулем pygwy.

Термин «Скриптовый интерфейс на Python» подразумевает, что скрипты в Gwyddion написаны на Python. Python является мощным, широко используемым высокоуровневым интерпретируемым языком программирования общего назначения с ясным, легким для понимания синтаксисом, широким набором библиотек и поддержкой большого числа операционных систем и сред. Все доступные возможности и потенциал языка Python можно использовать в скриптах в Gwyddion. Единственной новой вещью будет то, что вы также получите доступ к структурам данных, функциям и состоянию программы Gwyddion.

Расширение и встраивание, модули и модули.

Поскольку Python и Gwyddion можно использовать совместно несколькими различными способами и обе программы широко используют термин «модуль» для обозначения различных по своей природе вещей, требуется некоторое уточнение формулировок.

Gwyddion предоставляет модуль расширения Python под названием gwy. Таким образом, можно запустить Python, загрузить модуль gwy так же, как любой другой модуль языка с помощью команды

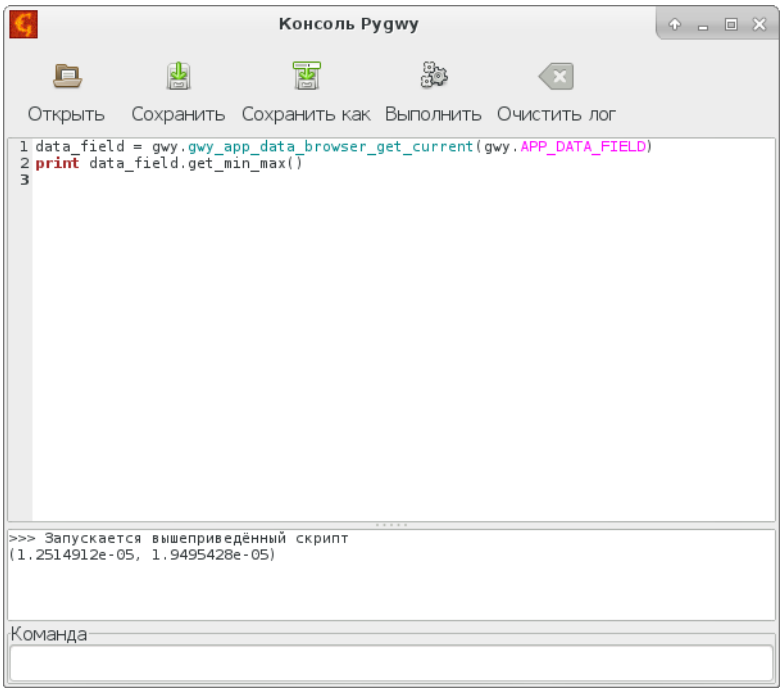
```
import gwy
```

и начать использовать его функции и классы в командной оболочке Python или скрипте. Этот режим называется автономный скрипт pygwy. Естественно, что при этом вы запускаете Python, а не Gwyddion. таким образом, нельзя использовать функциональность, относящуюся к взаимодействию с Gwyddion (программой). Даже если экземпляр Gwyddion запущен параллельно, он полностью независим от скрипта и не может напрямую управляться им.

С одной стороны, модуль pygwy (модуль Gwyddion) позволяет комбинировать эти вещи в обратном порядке и запускать интерпретатор языка Python внутри программы Gwyddion, тем самым встраивая Python в Gwyddion. если запустить пункт меню Обработка данных → Консоль Pygwy, появится оболочка для Python, в которой можно будет выполнять команды языка. В этом случае код на Python может взаимодействовать с текущим запущенным экземпляром Gwyddion различными способами. Скрипт, запущенный таким путём обычно называется просто скрипт pygwy (безо всяких дополнительных уточнений).

Пункт Команда в нижней части окна консоли позволяет выполнять отдельные простые команды. Они запускаются сразу после нажатия Enter и их вывод печатается в область журнала выше.

Более длинные скрипты могут быть набраны, скопированы или загружены в основную область в верхней части. Кнопка Выполнить (Ctrl-E) при этом запускает скрипт. Вывод скрипта снова будет записан в область журнала вместе с любыми сообщениями об ошибках. Другие кнопки управления позволяют сохранять (Ctrl-S) и загружать (Ctrl-O) скрипты. Кнопка Очистить журнал очищает область журнала.



Консоль Pygwy, демонстрирующая простой скрипт (печатающий диапазон значений для текущего изображения) и его вывод.

также существуют некоторые другие небольшие отличия от автономно запускаемых скриптов. Модуль gwy всегда автоматически импортирован для консоли. В дополнение, он будет доступен здесь даже если вы найдёте модуль расширения Python на диске и удалите его, поскольку здесь он генерируется на лету из Gwyddion.

И, наконец, можно писать модули расширения Gwyddion на Python. Такие модули будут появляться в меню Обработка данных подобно другим функциям обработки данных. также можно написать модули, которые реализуют загрузку и сохранение данных в новых форматах. Это слегка более запутанный процесс, чем предыдущие два варианта и будет более подробно объяснён ниже. Этот тип модулей обычно называется модуль обработки данных на Python (в контексте Gwyddion) или модуль Gwyddion для обработки данных на Python, если контекст неясен.

В дополнение к основному модулю gwy, также есть небольшой модуль gwyutils, который предоставляет некоторые дополнительные функции. Часть из них предоставляет обходные пути для функциональности, которая обычно не покрывается в достаточной степени самим модулем gwy и по большей части является устаревшей. Некоторая часть, однако, по прежнему полезна. Модуль gwyutils не импортируется автоматически; его всегда требуется подгрузить в явном виде с помощью команды

```
import gwyutils
```

В зависимости от того, как Gwyddion был установлен, может потребоваться добавить путь до gwyutils.py в sys.path перед этим:

```
import sys
sys.path.append('/the/path/to/the/gwyutils/module')
```

Поля данных — как представлены изображения

Наверное наиболее важной из структур данных Gwyddion, с которой вам придётся работать, будет DataField, которая представляет изображение.

По существу она представляет собой массив $N \times M$ значений данных с плавающей точкой, который также содержит некоторую дополнительную информацию, такую как размеры и единицы измерения. Значения данных всегда хранятся в основных единицах СИ (т.е. метрах или Вольтах, не в нанометрах или милливольтах). В большинстве случаев вы будете работать со структурами DataField, полученными из какого-то файла. Однако, создание нового заполненного нулями поля данных размером 128 на 128 точек (с физическими размерами один на один) не является сложным:

```
data_field = gwy.DataField(128, 128, 1.0, 1.0)
```

Размеры в пикселях называются в Gwyddion разрешениями и могут быть получены используя функции get_xres() и get_yres():

```
# Ширина в пикселях
xres = data_field.get_xres()

# Высота в пикселях
yres = data_field.get_yres()
```

Также можно создать поле данных как копию другого:

```
another_field = data_field.duplicate()
```

или сделать его таким же, как другое, но заполнить при этом нулями:

```
similar_field = data_field.new_alike()
```

Объект DataField имеет множество методов от простых, таких как получение физических размеров или простых статистических свойств:

```
# Физические размеры
xreal, yreal = data_field.get_xreal(), data_field.get_yreal()

# Диапазон значений
zmin, zmax = data_field.get_min_max()

# Среднее значение
mean = data_field.get_avg()
```

до сложных, которые проводят нетривиальные операции со множеством настраиваемых параметров, такие как удаление штрихов (царапин)

```
data_field.mark_scars(result_field, high, low, min_len, max_width, False)
```

Их все можно найти в справочной документации. Некоторые распространённые операции могут включать в себя сочетание нескольких функций вместе. Например, эквивалентом функции Исправить нуль можно получить комбинацией get_min() и add():

```
data_field.add(-data_field.get_min())
```

Если вы делаете более сложную обработку данных, простое использование имеющихся методов может быть недостаточным, и возможно потребуется читать или менять непосредственно значения отдельных пикселей. Для этого есть несколько возможных методов. Простейшим будет прямая индексация; чтобы прочитать значение в верхнем левом углу можно использовать просто

```
value = data_field[0]
```

и аналогично

```
data_field[0] = 1.5
```

установит значение в верхнем левом углу в 1.5. Следует отметить, что данные изображения представлены в «плоском» виде, т.е. представлены в виде одного большого массива, упорядоченного строка за строкой, и даже несмотря на то, что DataField представляет собой изображение, используется только один индекс (в противоположность раздельным индексам для строк и столбцов). Таким образом, последнее значение в третьей строке поля данных размером 128 на 128 может быть изменено на -1.0 с помощью команды

```
data_field[2*128 + 127] = -1.0
```

Другим возможным вариантом будет использование методов get_data() и set_data() которые извлекают полный набор данных в список Python и заполняют полный набор данных DataField из списка Python (или другой последовательности), соответственно. Следует заметить, что эти методы всегда копируют данные. Если изменить список после извлечения, при этом не поменяются значения поля данных и наоборот. Например, если вы не боитесь запачкать руки, Исправить нуль может быть реализован заново следующим образом:

```
data = data_field.get_data()
m = min(data)
data = [z-m for z in data]
data_field.set_data(data)
```

наконец, если использовать NumPy, вам возможно потребуется напрямую проводить операции над полем данных с использованием функций NumPy. Вспомогательный модуль gwyutils предоставляет функции, которые позволяют это делать. Вызов

```
array = gwyutils.data_field_data_as_array(data_field)
```

создаёт массив NumPy, который будет содержать данные поля данных. Этот подход необходимо использовать осторожно, поскольку некоторые операции с типом DataField меняют представление данных (например, меняют размер) и после этого массив NumPy ломается. В общем случае не рекомендуется смешивать случайным образом операции с массивом и методы DataField.

Когда вы закончили менять поле данных соответствующее изображению в Gwyddion, необходимо вызвать

```
data_field.data_changed()
```

Это посылает сигнал объекту DataField, уведомляющий что все окна данных и миниатюры, показывающие изображение, должны обновить сами себя. В общем случае это должно быть сделано по одному разу для каждого изменённого поля данных в конце скрипта (или после того, как вы закончили работать с конкретным изображением). Если забыть сделать это, отображаемая информация может оказаться рассинхронизированной с реальным содержимым изображений.

Контейнеры — как представлены файлы

Файл СЗМ представлен в виде класса Container, который является похожим на словарь объектом, содержащим всё, что может быть в файле GWY. Каждый файл при импорте преобразуется в Container с аналогичной структурой. Таким образом файлы GWY и любые другие типы файлов не отличаются после того, как они будут загружены в программу.

Элементы в типе Container идентифицируются строковыми ключами (или эквивалентыми целочисленными ключами, хотя в Python их использование будет более редким), например, "/0/data" идентифицирует изображение номер 0 и "/5/select/rectangle" идентифицирует прямоугольное выделение на изображении номер 5. Положение отдельных фрагментов данных описано в спецификации формата файла GWY.

Можно получить доступ к элементам объекта Container путём простого индексирования:

```
# Сделать изображением 0 наше поле данных
container['/0/data'] = data_field

# Получить прямоугольное выделение для изображения 5
selection = container['/5/select/rectangle']
```

Однако, Container отличается от словаря Python в некоторых аспектах. Он может содержать только определённые типы данных: булевы, целочисленные, значения с плавающей точкой, строки и объекты Gwyddion, которые можно перевести в последовательную форму (что фактически означает любой объект данных в Gwyddion, который может вам встретиться. Он содержит такие методы, как set_object_by_name() или get_boolean_by_name(), которые уточняют тип данных, который будет сохранён или извлечён и их можно использовать вместо индексации. Более того, даже с этими ограничениями, если начать сохранять случайные вещи под случайными именами здесь, в результате не получится то, что Gwyddion понимает как файл СЗМ, и скорее всего это нарушит его нормальную работу вплоть до падения. Следовательно, всегда нужно использовать имена элементов, заданные в спецификации и соответствующие им типы элементов.

Функции, которые помогают с конструированием ключей, идентифицирующих различные элементы в файле, называются gwy_app_get_(something_key_for_id()), где «something» заменяется на тип элемента. Так, ключ для изображения 3 может быть сконструирован используя

```
key = gwy.gwy_app_get_data_key_for_id(3)
```

Следует отметить, что эти функции конструируют целочисленные ключи (которые работают столь же хорошо, но непонятны для пользователя). Можно использовать функции gwy_name_from_key() и gwy_key_from_name() чтобы делать преобразования между целочисленными и строковыми ключами. Вызов

```
gwy.gwy_name_from_key(gwy.gwy_app_get_data_key_for_id(3))
```

вернёт "/3/data", как и ожидалось.

Список всего, содержащегося внутри объекта Container может быть получен с помощью методов keys(), который выдаёт список целочисленных ключей, или keys_by_name() который выдаёт список строковых идентификаторов. Это может иногда пригодиться если вы хотите просканировать содержимое контейнера. В большинстве случаев, однако, функции для работы с отдельными типами данных могут оказаться более удобными.

Другие типы данных

Файл Gwyddion содержит не только изображения. Он также может содержать маски, выбранные области, объёмные данные, графики, данные XYZ, ... Таким образом здесь мы вкратце опишем остальные объекты, которые вы имеете шанс встретить на своём пути.

DataField также используется для представления масок и презентаций. Они должны иметь те же пространственные размеры, что и основное поле данных. В полях данных маски значение 1 (или больше) означает маску и 0 (или меньше) отсутствие маски. Значений между 0 и 1 следует избегать. Для презентаций диапазон значений не важен. Они сохраняются под ключами в виде "/0/mask" или "/0/show".

Container также используется для представления метаданных. Элементы типа Container метаданных используют другие правила: все значения метаданных должны быть строками. В остальном и ключи, и значения записываются в свободной форме.

Brick представляет объёмные данные. Он очень похож на DataField за исключением того, что он имеет три оси размеров вместо двух.

DataLine представляет наоборот одномерные данные снятые с фиксированным шагом. В реальной жизни вы не встретите их в файлах GWY (графики кривых представлены другим образом), но они используются в различных функциях обработки данных.

Spectra представляет набор кривых спектров, т.е. данных спектроскопии в отдельных точках.

SIUnit представляет физические единицы измерения. Это вспомогательный объект, который не встретится сам по себе, но практически любой другой тип объектов данных будет содержать внутри элементы SIUnit задающие физические единицы измерения осей размеров или данных.

GraphModel представляет график, содержащий набор кривых.

GraphCurveModel представляет отдельную кривую на графике.

Selection представляет выделенные элементы на изображении или графики. Они представляют собой последовательности координат. Selection фактически является абстрактным базовым классом, каждый тип выделенных элементов (точка, линия, прямоугольник, ...) это отдельный подкласс.

Поиск и перебор данных

Зная всё про элементы Container, DataField and SIUnit возможно вы также захотите узнать как добраться до данных, которые нужно обрабатывать.

В контексте скриптов или модулей, которые должны работать с данными, активными в данный момент, как делают обычные модули обработки данных Gwyddion, вопрос ставится как каким образом можно получить активные в данный момент данные. Ответом будет функция gwy_app_data_browser_get_current(). Она принимает аргумент AppWhat, задающий какой тип текущего элемента вам нужен и возвращает соответствующий элемент. Она может использоваться чтобы получить сами объекты данных

```
# Получить текущее активное изображение (DataField)
data_field = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_DATA_FIELD)

# Получить текущий файл (Container)
container = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_CONTAINER)
```

или их номер в файле

```
# Получить номер активного изображения
i = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_DATA_FIELD_ID)

# Получить номер активного графика
i = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_GRAPH_MODEL_ID)
```

или их целочисленные ключи

```
# Получить ключ активного изображения
key = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_DATA_FIELD_KEY)

# Получить ключ активного поля данных маски
key = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_MASK_FIELD_KEY)
```

и некоторых менее распространённых вещей, таких как текущая активная страница в браузере данных. Если активных элементов требуемого типа нет, функция возвращает None.

С другой стороны, нередко необходимо найти все данные определённого типа в файле. Список всех номеров изображений (каналов) может быть получен с помощью

```
ids = gwy.gwy_app_data_browser_get_data_ids(container)
```

Когда функция возвращает список [0, 1, 4] это означает, что контейнер содержит изображения с номерами 0, 1 и 4. Другими словами, там будут изображения с ключами "/0/data", "/1/data" и "/4/data". Подобные функции будут для перечисления графиков, спектров, объёмных данных и данных XYZ. Также есть функция gwy_app_data_browser_get_containers() которая возвращает список всех файлов (т.е. элементов Container соответствующих файлам), которые в данное время открыты.

Наконец, нередко полезно найти объекты данных по заголовку. Для этого представлена простая функция поиска gwy_app_data_browser_find_data_by_title() Она сравнивает заголовки используя символы подстановки так же, как командная оболочка Unix:

```
# Найти изображения с заголовком точно соответствующим "Height"
ids = gwy.gwy_app_data_browser_find_data_by_title(container, 'Height')

# Найти изображения с заголовком, начинающимся с "Current"
ids = gwy.gwy_app_data_browser_find_data_by_title(container, 'Current*')

# Найти изображения с заголовком, содержащим "03"
ids = gwy.gwy_app_data_browser_find_data_by_title(container, '*03*')
```

Когда вы добавляете новое изображение или другой тип данных в файл используйте функцию браузера данных:

```
i = gwy.gwy_app_data_browser_add_data_field(container, data_field, True)
```

Последний параметр задаёт, показывать ли данные в окне данных или нет. Функция возращает номер, присвоенный новому полю данных. Можно затем использовать его для конструирования идентификаторов связанных данных. Подобные функции существуют для других типов данных.

Выполнение функций модуля

Использование DataField (и других) методов, возможно в комбинации с небольшим использованием прямого доступа к данным, является наиболее простым и часто предпочтительным подходом к обработке данных в скрипте pygwy. Тем не менее, иногда вам необходимо запустить функцию Gwyddion точно таким же образом, как если бы она была выбрана из меню. Либо потому, что это функция не доступна напрямую как метод DataField и не может быть легко скопирована, или вы предпочитаете писать скрипт как макрос, который вызывает различные существующие функции Gwyddion.

Функция обработки данных (соответствующая элементу меню или панели инструментов) запускается используя gwy_process_func_run():

```
gwy.gwy_process_func_run('level', container, gwy.RUN_IMMEDIATE)
```

Первый аргумент 'level' это имя функции, второй это контейнер (который всегда должен быть текущим контейнером чтобы не происходили разные странные вещи) и последний аргумент это режим, в котором запускать функцию. Функции обработки данных имеют два возможных режима: RUN_INTERACTIVE, который означает, что если у функции есть какие-либо диалоговые окна, она должна их показать, и RUN_IMMEDIATE, который означает, что функция не должна показывать диалоговых окон и должна немедленно выполнить нужную операцию. Следует отметить, что не для всех функций доступны оба режима. У некоторых отсутствует интерфейс пользователя, в то время, как другие могут быть запущены исключительно интерактивно.

Как функция узнаёт, какие из данных нужно обрабатывать? Она обрабатывает текущие данные. Для макросоподобных скриптов и функций обработки данных, написанных на Python это в точности то, что вы хотите. Можно также выбрать (сделать текущими) другие данные в скрипте, как описано в следующем разделе.

Где окажется результата работы? Некоторые из функций меняют существующие данные, некоторые создают новые изображения (и иные виды выходных данных). Некоторые даже позволяют выбирать между этими двумя вариантами. То, что функция делает при запуске из графического интерфейса, она также делает при запуске из скрипта pygwy. Если создаются новые изображения, вам необходимо их найти. Это можно сделать следующим образом:

```
ids_before = set(gwy.gwy_app_data_browser_get_data_ids(container))
gwy.gwy_process_func_run('some_func', container, gwy.RUN_IMMEDIATE)
ids_after = set(gwy.gwy_app_data_browser_get_data_ids(container))
new_ids = ids_after - ids_before
```

Обычно множество new_ids будет содержать единственный элемент, численный идентификатор только что созданного изображения, но некоторые модули могут создавать несколько элементов выходных данных.

Использование функций модулей может чередоваться с операциями непосредственно над полями данных DataField. Если так делать, то важно знать, что функции модулей могут менять, добавлять, удалять и заменять элементы данных в контейнере. Следующий фрагмент кода, который запускает функцию и получает поле данных

```
gwy.gwy_process_func_run('weird_func', container, gwy.RUN_IMMEDIATE)
data_field = container['/5/data']
```

не будет эквивалентом

```
data_field = container['/5/data']
gwy.gwy_process_func_run('weird_func', container, gwy.RUN_IMMEDIATE)
```

поскольку функция 'weird_func' могла заменить (или удалить) поле данных в '/5/data'. Таким образом, хотя data_field будет оставаться правильным элементом DataField, она может больше не соответствовать изображению номер пять в файле.

Имя функции это имя высокоуровневых «функций» предоставляемых модулями обработки данных. Каждой соответствует какое-то действие, доступное из меню Обработка данных. Если вы расширяет функции Gwyddion с помощью модуля, функции, которые он задаёт будут доступны тем же путём, что и функции встроенных модулей.

Список функций может быть получен различными путями (кроме изучения исходного кода):

- Используя онлайновый просмотр модулей. Если навести мышь поверх имени модуля, браузер покажет список предоставляемых функций. Те, у которых тип указан как «proc», являются функциями обработки данных. Если знать путь в меню, функция может быть быстро найдена поиском в расширенном онлайновом браузере модулей. Следует отметить, что онлайновый браузер показывает модули (и функции) доступные в последнем стабильном релизе.
- Отыскать функцию в Gwyddion в меню Информация → Просмотр модулей. Здесь представлена та же информация, что и в онлайновом браузере, за исключением того, что здесь будут перечислены модули и функции присутствующие в текущей инсталляции Gwyddion.
- Используя журнал. Когда вы используете функцию обработки данных, она появляется в журнале, включая имена её параметров, называемые настройки. Это пожалуй наиболее удобный способ поскольку можно интерактивно увидеть функции, появляющиеся в журнале, по мере того, как вы их выполняете.

Некоторые функции не имеют настраиваемых параметров, например, "fix_zero". Но многие имеют по несколько параметров и некоторые имеют много параметров. Последние использованные значения всех параметров

сохранены в настройках. При выполнении функции обработки данных она читает параметры из настроек, и, в зависимости от режима, либо сразу выполняет операцию, либо показывает диалоговое окно, где можно настроить значения. Следовательно, если просто запустить функцию из скрипта pygwy, она будет использовать параметры сохранённые в настройках. Это полезно если вы планируете сначала использовать функцию интерактивно, подобрать хороший набор параметров, и затем запускать её много раз с точно такими же настройками используя скрипт.

С другой стороны, иногда может потребоваться выполнить функцию из скрипта с заданным набором настроек. В этом случае можно получить настройки с помощью команды

```
settings = gwy.gwy_app_settings_get()
```

Результатом будет снова Container и снова существуют некоторые правила что и где хранится в нём. Настройки функций модуля обычно хранятся под именем "/module/modulename". Для настроек модулей отсутствует формальная документация и фактически есть два способа найти какие у модуля есть настройки: наблюдать за журналом, в котором будут перечислены все параметры и посмотреть файл настроек settings. Например, модуль выравнивания плоскости может быть запущен с использованием маски установленным в исключить маску следующим образом (следует отметить, что такого же результата можно достичь напрямую используя методы DataField):

```
settings['/module/level/mode'] = int(gwy.MASKING_EXCLUDE)
gwy.gwy_process_func_run('level', container, gwy.RUN_IMMEDIATE)
```

Работа с файлами

Одним из основных предназначений скриптов является автоматизация операций, которые нужно проводить неоднократно. Это нередко включает обработку нескольких блоков или всех данных в файле и последовательную обработку нескольких файлов данных.

Касательно обработки нескольких изображений в одном файле, функции перечисления и поиска данных, описанные выше, легко позволяют получить необходимые данные. Простой полный пример скрипта, который выравнивает вычитанием средней плоскости все изображения в файле может быть записан следующим образом:

```
container = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_CONTAINER)
for i in gwy.gwy_app_data_browser_get_data_ids(container):
    data_field = container[gwy.gwy_app_get_data_key_for_id(i)]
    coeffs = data_field.fit_plane()
    data_field.plane_level(*coeffs)
    data_field.data_changed()
```

Для выполнения функции обработки данных с помощью gwy_process_func_run(), последним недостающим фрагментом является выбор изображения в браузере данных, так что они могли работать с корректными. Это делается вызовом gwy_app_data_browser_select_data_field():

```
gwy.gwy_app_data_browser_select_data_field(container, i)
```

где i — номер изображения. Подобные функции существуют для других типов данных. После завершения обработки рекомендуется снова выбрать то изображение, которые было выбрано вначале. Если забыть сделать это инструменты могут вести себя странно (по крайней мере пока не будет выбрано другое изображение переключением в его окно данных). Небольшой завершенный скрипт выполняющий функцию обработки данных для всех изображений в текущем файле может быть записан следующим образом:

```
container = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_CONTAINER)
orig_i = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_DATA_FIELD_ID)
for i in gwy.gwy_app_data_browser_get_data_ids(container):
    gwy.gwy_app_data_browser_select_data_field(container, i)
    gwy_process_func_run('align_rows', container, gwy.RUN_IMMEDIATE)
gwy.gwy_app_data_browser_select_data_field(container, orig_i)
```

Также просто перебираются все открытые файлы с использованием функции gwy_app_data_browser_get_containers():

```
for container in gwy.gwy_app_data_browser_get_containers():
    for i in gwy.gwy_app_data_browser_get_data_ids(container):
        # Ничего нового здесь
```

Чтобы обработать несколько файлов с диска необходимо найти способ найти или идентифицировать их на диске, но это выходит за рамки данного руководства (Модули Python glob и os могут помочь в данном случае). Чтобы загрузить файл данных СЗМ можно использовать просто gwy_file_load():

```
container = gwy.gwy_file_load(filename, gwy.RUN_NONINTERACTIVE)
```

Эта функция определяет тип файла и вызывает правильный модуль работы с файлами чтобы загрузить его. Полученный в результате Container не будет добавлен автоматически в браузер данных. Другими словами, Gwyddion не знает о нём и не может непосредственно использовать функции модулей обработки данных на его содержимом. Это ваш личный Container. Можно добавить его в браузер данных используя

```
gwy.gwy_app_data_browser_add(container)
```

В качестве альтернативы можно использовать функцию загрузки файлов из приложения

```
container = gwy.gwy_app_file_load(filename)
```

которая не только загружает файл, но и добавляет его в браузер данных. Когда нужно обработать много файлов требуется также убедиться, что они не скапливаются в оперативной памяти. Функция gwy_app_data_browser_remove() удаляет Container из браузер данных. Чтобы действительно освободить ресурсу нужно также убедиться, что объекты данных не удерживаются в каких-то других структурах данных в вашем скрипте.

Следует отметить, что мы использовали RUN_NONINTERACTIVE вместо RUN_IMMEDIATE в примере функции gwy_file_load(). Функции работы с файлами имеют два возможных режима, RUN_INTERACTIVE, который означает то же самое, что и для функций обработки данных, и RUN_NONINTERACTIVE, который означает что функция не должна показывать никаких диалоговых окон. Большинство функций работы с файлами не имеют никакого интерфейса пользователя, заметными исключениями являются экспорт изображений и импорт сырых данных и других типов данных, которые не могут быть загружены автоматически.

Сохранение файла происходит подобным образом:

```
gwy.gwy_file_save(container, filename, gwy.RUN_NONINTERACTIVE)
```

Формат файла определяется автоматически из расширения. Эта же функция может быть использована для экспорта изображений. Существует два основных метода создания файла с изображением, отрисованным псевдоцветом. Простая функция gwy_app_get_channel_thumbnail() создаёт GdkPixbuf который затем можно сохранить в файл используя его метод save(). Этот подход наиболее полезен для значков и простых изображений предпросмотра. Если вы хотите использовать все возможности модуля экспорта изображений, то можно использовать функцию gwy_file_save() в формат изображений (PNG, PDF, SVG, ...)

```
gwy.gwy_file_save(container, "image.png", gwy.RUN_NONINTERACTIVE)
```

Естественно, подобно функциям обработки данных, модуль экспорта изображений будет отрисовывать его в соответствии с текущими настройками. Можно изменить настройки (они находятся в поддереве "/module/pixmap") чтобы рисовать изображение заданным образом. Учитывайте, что экспорт изображений имеет очень много настроек.

Можно совместить всё вместе в простом отдельном скрипте, который будет загружать все файлы в текущем каталоге, соответствующие заданному шаблону, находить канал высоты в каждом, производить некоторое выравнивание, вызывая функции из модулей, и извлекать несколько основных статистических величин:

```
import gwy, glob, sys

# Set up parameters for the 'align_rows' function.
settings = gwy.gwy_app_settings_get()
settings['/module/linematch/direction'] = int(gwy.ORIENTATION_HORIZONTAL)
settings['/module/linematch/do_extract'] = False
settings['/module/linematch/do_plot'] = False
```

```
settings['/module/linematch/method'] = 2

print 'Filename\tRa\tRms\tSkewness\tKurtosis'

# Go through files matching a given pattern:
for filename in glob.glob('MARENA-0??C-Maximum.0??'):
    container = gwy.gwy_file_load(filename, gwy.RUN_NONINTERACTIVE)
    gwy.gwy_app_data_browser_add(container)

    # Find channel(s) called 'Height', expecting to find one.
    ids = gwy.gwy_app_data_browser_find_data_by_title(container, 'Height')
    if len(ids) == 1:
        i = ids[0]
        # Select the channel and run some functions.
        gwy.gwy_app_data_browser_select_data_field(container, i)
        gwy.gwy_process_func_run('align_rows', container, gwy.RUN_IMMEDIATE)
        gwy.gwy_process_func_run('flatten_base', container, gwy.RUN_IMMEDIATE)
        # Extract simple statistics and print them.
        data_field = container[gwy.gwy_app_get_data_key_for_id(i)]
        avg, ra, rms, skew, kurtosis = data_field.get_stats()
        print '%s\t%g\t%g\t%g\t%g' % (filename, ra, rms, skew, kurtosis)
    else:
        sys.stderr.write('Expected one Height channel in %s but found %u.\n'
                         % (filename, len(ids)))

    gwy.gwy_app_data_browser_remove(container)
```

Написание модулей в Python

Модули Python не слишком отличаются от скриптов. Однако, они должны определять определённые функции и переменные чтобы gwyddion знал какой тип функциональности предоставляет модуль, куда поместить его в меню или как его запускать. Gwyddion распознаёт несколько типов модулей: файловые, обработки данных (точнее, обработки данных изображений), графиков, обработки объёмных данных, обработки данных XYZ, слоёв и инструментов. Последние два типа являются сложными и не могут быть написаны в настоящее время на Python. Все остальные типы могут.

Все модули расширения написанные на Python должны помещаться в каталог пользователя в подкаталоге pygwy. Это будет ~/.gwyddion/pygwy (Unix) или Documents and Settings\gwyddion\pygwy (старые версии MS Windows) чтобы Gwyddion мог найти их.

Переменные, которые модуль должен определить, являются более или менее общими для всех типов. По историческим причинам они все имеют префикс plugin_, хотя module_ в настоящее время было бы более подходящим:

plugin_type Тип модуля, как строка в верхнем регистре. Может быть одной из "FILE", "PROCESS", "GRAPH", "VOLUME" и "XYZ", которые соответствуют доступным типам модуля очевидным образом.

plugin_desc Короткое описание функции, используемое в подсказках для модулей обработки данных и в качестве описания типа файла в модулях работы с файлами.

plugin_menu Путь в меню, где модуль должен появиться, в виде строки где косой чертой обозначаются подменю. Путь в меню записывается относительно корня меню для функций модуля заданного типа. Например, модули обработки данных всегда будут появляться в меню Обработка данных и переменная не должна включать эту часть. Файловые модули не задают путь в меню (если они это делают, он игнорируется).

plugin_icon Опциональное имя иконки по умолчанию в виде строки (чтобы функцию можно было поместить в панель инструментов). Можно выбирать из наборов стандартных иконок Gwyddion и GTK+. В первом имен иконок содержат символы подчёркивания, например, "gwy_level", последний с символами дефисов, например, "gtk-execute". См. документацию по API для получения списка доступных иконок. Иконки, устанавливаемой по умолчанию, в Gwyddion нет.

plugin_sens Опциональные флаги чувствительности в виде комбинации значений GwyMenuSensFlags, таких как MENU_FLAG_DATA или MENU_FLAG_DATA_MASK. Флаги задают будет ли элемент меню (или кнопка панели инструментов) доступна. Если не задано, по умолчанию требовать чтобы присутствовал соответствующий тип данных, например, модули работы с графиками требуют чтобы в файле существовал

хотя бы один график. Обычно значения по умолчанию работают хорошо, но могут быть неправильными, например, для модулей синтеза данных (которые не требуют чтобы данные нужного типа уже были загружены), иногда модуль требует для своей работы обязательного наличия маски, и т.д.

plugin_run Опциональные флаги режима исполнения как комбинация флагов RUN_INTERACTIVE и RUN_IMMEDIATE. В основном полезно для указания, что функция требует взаимодействия с пользователем и не может быть запущена в неинтерактивном режиме. По умолчанию считается что функция может работать в обоих режимах.

Все типы модулей обработки данных (изображений, объёмных и XYZ) должны определить функцию run(), которая принимает два аргумента, текущий Container и режим (RUN_INTERACTIVE или RUN_IMMEDIATE). Если вам всё равно насчёт режима, можно также определить функцию с одним аргументом. Простой полный пример модуля обработки данных приведён ниже:

```
plugin_menu = "/Pygwy Examples/Invert"
plugin_desc = "Invert values"
plugin_type = "PROCESS"

def run(data, mode):
    key = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_DATA_FIELD_KEY)
    gwy.gwy_app_undo_qcheckpoint(data, [key])
    data_field = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_DATA_FIELD)
    data_field.invert(False, False, True)
    data_field.data_changed()
```

Он делает простую инверсию значений используя функцию invert() объекта DataField. Вызов gwy_app_undo_qcheckpoint() реализует правильную поддержку отмены операции. Если вы хотите поддерживать отмену, вызовите его со списком целочисленных ключей всех элементов данных, которые функция будет менять перед тем, как начнёте их менять.

Модули работы с графиками отличаются в мелочах, их функция run() принимает только один аргумент, типа Graph.

Модули работы с файлами должны предоставить несколько функций. Если они реализуют импорт файла, они определяют функции load() и detect_by_content(). Функция загрузки берёт имя файла (и опционально режим выполнения) и возвращает либо Container представляющий загруженный файл, либо None. Функция детекции должна определить, является ли файл файлом того формата, который реализован модуле. Она получает имя файла, байтовые строки содержащие начало и конец содержимого файла (поскольку они обычно содержат информацию полезную для определения типа файла) и размер файла. Она должна вернуть целочисленную оценку между 0 и 100, где 0 означает «определённо не этот тип файла» и 100 означает «точно этот тип файла». Ни один из файловых модулей Gwyddion не возвращает оценку больше 100. Если вам действительно нужно подменить встроенный модуль, то это можно сделать вернув оценку больше 100, но в общем случае это не рекомендуется.

Если модуль реализует сохранение файла, он наоборот должен определить функции save() и detect_by_name(). Функция сохранения принимает аргументы Container, имя файла и опционально режим выполнения и должна записать файл. Нередко вы не хотите или не можете сохранить всё, что есть в файле, открытом сейчас в Gwyddion. В этом случае можно получить текущее изображение (или другой объект данных) используя функцию gwy_app_data_browser_get_current() в точности как в модуле обработки данных и сохранить только это изображение. Функция детекции намного проще поскольку файл ещё только нужно записать и она может использовать только имя файла. Простой законченный пример файлового модуля, реализующего как загрузку, так и сохранение, приведён ниже. Настоящий модуль должен заботиться об обработке ошибок, которая не включена в этот пример для простоты и ясности:

```
plugin_type = "FILE"
plugin_desc = "High definition stable format store (.hdsf)"

def detect_by_name(filename):
    if filename.endswith(".hdsf"):
        return 100
    return 0

def detect_by_content(filename, head, tail, filesize):
    if head.startswith("HDSF:"):
```

```
        return 100
    return 0

def load(filename, mode=None):
    f = file(filename)
    header = f.readline()
    magic, xres, yres, xreal, yreal = header.split()
    xres, yres = int(xres), int(yres)
    xreal, yreal = float(xreal), float(yreal)
    container = gwy.Container()
    data_field = gwy.DataField(xres, yres, xreal, yreal)
    data_field.set_data([float(z) for z in f])
    container['/0/data'] = data_field
    return container

def save(container, filename, mode=None):
    data_field = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_DATA_FIELD)
    if not data_field:
        return False
    f = file(filename, 'w')
    f.write('HDSF: %d %d %g %g\n'
            % (data_field.get_xres(), data_field.get_yres(),
               data_field.get_xreal(), data_field.get_yreal()))
    f.write('\n'.join('%g' % z for z in data_field))
    f.write('\n')
    f.close()
    return True
```

Модули Pygwy перезагружаются если они были изменены со времени последнего использования. Таким образом, их можно менять при запущенном Gwyddion, при этом всегда будет использоваться последняя версия модуля. Однако, при этом они не регистрируются заново. Это означает, что записанный в файл код заново исполняется при перезапуске модуля, но значения переменных plugin_ имеют значение только при первой загрузке модуля. Последующие их изменения не будут влиять на работу пока Gwyddion не будет закрыт и перезапущен заново. Вследствие этого модуль работы с файлами не может внезапно стать модулем работы с графиками, возможно, что к лучшему.

Графический интерфейс пользователя

Если вы хотите добавить к модулю графический интерфейс, то можно использовать PyGTK совместно с виджетами Gwyddion для отображения данных. Следует отметить, что необходимо явно импортировать PyGTK командой

```
import gtk
```

поскольку, в отличие от gwy, оно не импортируется автоматически. Модуль с опциональным графическим интерфейсом пользователя должен в общем случае определить вариант run() с двумя аргументами и придерживаться заданного режима, действуя или сразу, или показывая сначала графический интерфейс. Типичной структурой модуля будет:

```
import gtk

# Define module info...

def run(data, mode):
    if mode == gwy.RUN_INTERACTIVE:
        dialogue = gtk.Dialog(title='Title...', flags=gtk.DIALOG_MODAL,
                              buttons=(gtk.STOCK_CANCEL, gtk.RESPONSE_CANCEL,
                                       gtk.STOCK_OK, gtk.RESPONSE_OK))

        # Construct and show the user interface...

        response = dialogue.run()
        dialogue.destroy()
```

```
        if response != gtk.RESPONSE_OK:
            return

    # Process the data...
```

У скриптов Pygwy нет режима, они просто запускаются, таким образом, хотя они тоже могут показывать диалоговое окно похожим образом, если они так делают, то оно будет показываться всегда. Создание и использование флажков, кнопок, ползунков, элементов ввода и других элементов интерфейса пользователя выходит за рамки данного руководства. В этом случае вам нужно обратиться к подробной документации PyGTK.

Модуль может использовать настройки таким же образом, как и другие модули Gwyddion. В начале, прочесть параметры из файла настроек, обработать случай когда в файле настроек ещё нет значений параметров:

```
settings = gwy.gwy_app_settings_get()

tuning_parameter = 1.0
if '/module/mymodule/tuning_parameter' in settings:
    tuning_parameter = settings['/module/mymodule/tuning_parameter']
```

и в конце работы сохранить параметры в файл настроек чтобы их можно было восстановить при следующем запуске:

```
settings['/module/mymodule/tuning_parameter'] = tuning_parameter
```

Если нужно показать данные изображений, можно использовать виджет Gwyddion DataView. Он работает не совсем напрямую. Вместо того, чтобы передать DataField, который необходимо показать, вы всегда передаёте Container и затем указываете, где там найти что нужно показывать. Показ изображений реализуется путём создания так называемого слоя просмотра данных и добавления его к отображению данных. Простой модуль, который просто показывает текущее изображение может выглядеть как:

```
import gtk, gobject

plugin_menu = "/Pygwy Examples/Display Data"
plugin_desc = "Just display the current image"
plugin_type = "PROCESS"

def run(data, mode):
    dialogue = gtk.Dialog(title='Display Data', flags=gtk.DIALOG_MODAL,
                          buttons=(gtk.STOCK_CLOSE, gtk.RESPONSE_CLOSE,))

    data_field = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_DATA_FIELD)

    container = gwy.Container()
    container['/0/data'] = data_field

    data_view = gwy.DataView(container)
    data_view.set_zoom(400.0/data_field.get_xres())
    data_view.set_data_prefix('/0/data')

    layer = gwy.LayerBasic()
    layer.set_data_key('/0/data')
    data_view.set_base_layer(layer)

    dialogue.vbox.pack_start(data_view, False, 4)

    dialogue.show_all()
    dialogue.run()
    dialogue.destroy()
```

Следует отметить использование функции set_zoom(), которая ограничивает размер области просмотра до 400 пикселей.

Чтобы позволить пользователю интерактивно выбирать точки или линии на изображении предпросмотра необходимо создать другой слой, именуемый векторным слоем, и добавить его к представлению данных. Каждый

векторный слой имеет соответствующий тип Selection, который содержит координаты выбранных геометрических фигур. Простой модуль, позволяющий пользователю выбрать точку на изображении и показывающий её координаты может быть написан следующим образом:

```
import gtk, gobject

plugin_menu = "/Pygwy Examples/Analyse"
plugin_desc = "Display the current image and selected coordinates"
plugin_type = "PROCESS"

def update_info_label(selection, i, label, vformat):
    coords = selection.get_data()
    if not coords:
        label.set_markup('')
        return

    label.set_markup('(%.*f, %.*f) %s'
                     % (vformat.precision, coords[0]/vformat.magnitude,
                        vformat.precision, coords[1]/vformat.magnitude,
                        vformat.units))

def run(data, mode):
    dialogue = gtk.Dialog(title='Analyse Data', flags=gtk.DIALOG_MODAL,
                          buttons=(gtk.STOCK_CLOSE, gtk.RESPONSE_CLOSE,))

    data_field = gwy.gwy_app_data_browser_get_current(gwy.APP_DATA_FIELD)

    container = gwy.Container()
    container['/0/data'] = data_field

    data_view = gwy.DataView(container)
    data_view.set_zoom(400.0/data_field.get_xres())
    data_view.set_data_prefix('/0/data')

    layer = gwy.LayerBasic()
    layer.set_data_key('/0/data')
    data_view.set_base_layer(layer)

    layer = gobject.new(gobject.type_from_name('GwyLayerPoint'))
    data_view.set_top_layer(layer)
    layer.set_selection_key('/0/select/point')
    selection = layer.ensure_selection()

    dialogue.vbox.pack_start(data_view, False, 4)

    info_label = gtk.Label()
    info_label.set_alignment(0.0, 0.5)
    dialogue.vbox.pack_start(info_label, False, 4)

    value_format = data_field.get_value_format_xy(gwy.SI_UNIT_FORMAT_VFMARKUP)
    selection.connect('changed', update_info_label, info_label, value_format)

    dialogue.show_all()
    response = dialogue.run()
    dialogue.destroy()
```

Примечания

Документация по функциям, доступным в Python, относительно полна, но ценой этого является то, что только небольшая часть её была написана специально для функций Python. Большая часть документации генерируется автоматически из документации по соответствующим функциям языка C. Вследствие этого иногда там содержатся остатки информации, которая относится только к C.

Это включает в себя правила принадлежности и другие правила для подобных массивам аргументов функций. В Python всё передаётся и возвращается по значению. В частности, это относится к строкам, которые в Python даже не модифицируются, поэтому любые комментарии о принадлежности и изменении строк не относятся к коду на Python.

Функции на Python в Gwyddion, которые принимают массив в качестве аргумента, принимают любую последовательность из Python (список, кортеж (tuple), массив, ...) с элементами требуемого типа (обычно либо вещественного, либо целочисленного). И если они возвращают данные в формате типа массива, они всегда возвращают созданные заново списки, которые можно менять не влияя ни на что.

Обычно функции на Python не принимают отдельные аргументы длины последовательности, о которых может быть написано в документации, сгенерированной из C. Если существует какое-либо ограничение на число элементов, оно естественно распространяется и на Python. Например, метод set_data() для типа Selection просто принимает координаты последовательности списком. Однако, длина последовательности должна быть кратна «размеру объекта», т.е. числу координат, представляющих один выбранный объект для данного типа выбранного элемента.

4.31 Подключаемые модули

Подключаемые модули - внешние программы, которые можно запустить из Gwyddion либо чтобы провести какую-нибудь операцию над данными, либо чтобы прочитать или записать данные в некотором стороннем формате. В общем, подключаемые модули - это программы, которые могут зарегистрировать себя в Gwyddion (например, печатая нечто в стандартный вывод) чтобы дать возможность Gwyddion создать элемент меню подключаемых модулей и которые могут использоваться для обработки данных (или операций ввода-вывода).

Обычно, предпочтительным способом расширения функциональности gwyddion являются обычные модули (modules, в отличие от plugins, о которых идёт речь в этом разделе), поскольку они являются динамическими библиотеками, связанными напрямую с Gwyddion во время исполнения, что позволяет гораздо более универсально взаимодействовать с программой и они, вследствие тех же причин, также работают быстрее. Например, подключаемые модули обычно не могут использовать существующие функции работы с данными Gwyddion и не могут менять данные в том же месте, для результата всегда создаётся новое окно. Программирование модулей также не тяжелее программирования подключаемых модулей, а возможно даже проще (в том случае, если вы знаете C).

Внимание Механизм подключаемых модулей объявлен устаревшим. Он будет поддерживаться в Gwyddion 2.x, но не будет расширяться или улучшаться. Рекомендованным методом расширения функциональности Gwyddion подпрограммами на других языках является использование библиотек привязки к языкам, на текущий момент доступен интерфейс для языка Python. Рекомендованным способом запуска сторонних программ является написание небольшого специализированного модуля на C, который будет описывать взаимодействие с этими программами.

Глава 5

Сводки и таблицы

В этом разделе представлены справочные данные о различных форматах, синтаксисе и опциях команд, которые могут оказаться полезными. Большая часть относится к продвинутому использованию Gwyddion, кроме, возможно, таблицы общих сочетаний клавиш и таблицы поддерживаемых файловых форматов.

5.1 gwyddion

gwyddion — Отображение и анализ данных СЗМ

Аннотация

gwyddion [ОПЦИЯ...] [ФАЙЛ...]

Описание

Gwyddion – графическая программа отображения и анализа данных СЗМ (Сканирующей Зондовой Микроскопии), написанная с использованием Gtk+.

Параметры

Программа принимает все стандартные опции Gtk+, Gdk и GtkGLExt, такие, как --display или --sync. См. документацию по этим пакетам для описания опций тулкитов.

Поведение опции удалённого управления --remote-* не определено, когда на данном дисплее запущено более одного экземпляра Gwyddion. Они могут выбирать произвольный экземпляр программы для работы с ним. Последняя заданная опция удалённого управления (включая --new-instance) переопределяет все предыдущие заданные.

Если каталог задан как аргумент ФАЙЛ, программа открывает диалог выбора файлов в заданном каталоге.

Опции Gwyddion:

--help Выводит короткую справку и завершается.

--version Выводит информацию о версии и завершается.

--no-splash Отключает заставку при старте.

--remote-new Открывает на экране файлы заданные в командной строке в запущенном экземпляре Gwyddion. Запускает новый экземпляр, если ни одного не запущено.

Вероятно, это наиболее полезная из опций удалённого управления. Ассоциации с типами файлов обычно настроены для запуска Gwyddion с этой опцией.

--remote-existing Запускает файлы, указанные в командной строке, в уже запущенном экземпляре Gwyddion. Возвращает ошибку, если ни одного экземпляра не запущено.

Может быть полезно для случая, если вы хотите обрабатывать ситуацию с незапущенным Gwyddion иным способом, отличным от его запуска.

--remote-query Успешно завершается, если Gwyddion уже запущен на дисплее и печатает идентификатор экземпляра. Возвращает ошибку, если Gwyddion не запущен.

Идентификатор экземпляра зависит от используемого интерфейса удалённого управления. В некоторых случаях он представляет полезную информацию, как, например, глобальный идентификатор окна, в некоторых нет. С libXmu эта опция печатает X11 Window, на Win32 печатается HWND, в то время как с LibUnique печатается идентификатор запуска.

--new-instance Запускает новый экземпляр программы. Может также использоваться чтобы проигнорировать предыдущие опции удалённого управления и убедиться, что будет запущен новый экземпляр, когда меняется режим управления программой по умолчанию.

--identify Вместо запуска пользовательского интерфейса и открытия FILE, определяет тип файла для каждого и завершает свою работу.

Тип файла СЗМ, который будет напечатан, соответствует описанию, показанному в списке поддерживаемых форматов файлов в руководстве пользователя. За типом файла следует (в квадратных скобках) название модуля импорта файлов программы Gwyddion, который будет использован для загрузки файла, и оценка правильности детекции в баллах. Оценка значительно ниже 100 означает, что хотя в ходе детекции был найден возможно подходящий тип файла, но в правильности его детектирования нет уверенности.

Если тип файла вообще не распознан, то вместо типа файла печатается Unknown. Код выхода из программы будет 1 если любой из FILE не был распознан.

--check Вместо запуска пользовательского интерфейса и открытия FILE, загружает файлы, проверяет их на наличие ошибок (выводя ошибки на стандартный вывод ошибок stderr) и завершается.

--convert-to-gwy=OUTFILE.gwy Вместо запуска пользовательского интерфейса и открытия FILE, загружает файлы, объединяет все данные и записывает файл в формате GWY OUTFILE.gwy.

--disable-gl Полностью отключает OpenGL, включая все проверки на его доступность. Эта опция, разумеется, будет действовать только в том случае, если Gwyddion был собран с поддержкой OpenGL, и наиболее заметным эффектом от её использование будет недоступность опции трёхмерного просмотра. Однако, эта опция может оказаться полезной в том случае, если система сломана настолько, что даже проверка поддержки OpenGL приводит к ошибкам X-сервера. Также она может оказаться полезной при удалённом запуске Gwyddion через перенаправление X11, в том случае, если время запуска оказывается чрезмерно долгим.

--log-to-file Перенаправляет сообщения от GLib, Gtk+, Gwyddion, и т.д. в ~/.gwyddion/gwyddion.log или в файл, указанный в переменной окружения GWYDDION_LOGFILE. Эта опция наиболее полезна в среде Unix, поскольку на платформе Win32 сообщения по умолчанию перенаправляются в файл. Вывод сообщений в файл и на консоль не исключают друг друга, сообщения могут выводиться одновременно двумя вариантами.

--no-log-to-file Предотвращает перенаправление сообщений от GLib, Gtk+, Gwyddion, и т.д. в файл. Наиболее полезна на платформе Win32 (где сообщения перенаправляются в файл по умолчанию).

--log-to-console Выводит сообщения от GLib, Gtk+, Gwyddion, и т.д. на консоль. Точнее, отладочные сообщения выводятся в стандартный вывод, ошибки и предупреждения в стандартный поток ошибок. В Unix сообщения печатаются на консоль по умолчанию. Вывод сообщений в файл и на консоль не исключает друг друга, сообщения могут выводиться двумя вариантами одновременно.

--no-log-to-console Отменяет вывод сообщений на консоль. Наиболее полезна под Unix, где сообщения выводятся на консоль по умолчанию.

--disable-modules=MODULE,... Предотвращает регистрацию модулей с заданными именами. В основном полезно для разработки и отладки. Например, вам может пригодиться использование --disable-modules=pygwy при запуске под Valgrind для ускорения процесса (и возможно избежания дополнительных ошибок).

--startup-time Печатает общее время, затраченное на выполнение различных задач при старте (и закрытии). Полезно только для разработчиков и людей, собирающихся пожаловаться на слишком медленный запуск.

Окружение

На Linux/Unix следующие переменные окружения используются для переопределения вкомпилированных путей установки (версия под MS Windows всегда рассматривает пути относительно места установки). Они предназначены для переопределения системных путей установки и не являются списком путей, они могут содержать только один путь.

GWYDDION_DATADIR Основной каталог данных, куда были установлены файлы ресурсов (цветовые градиенты, материалы OpenGL, ...). Gwyddion ищет файлы ресурсов в его подкаталоге gwyddion.

Если не установлено, по умолчанию используется вкомпилированное значение ${datadir} обычно установленное в /usr/local/share.

GWYDDION_LIBDIR Основной каталог модулей, куда они были установлены. Gwyddion ищет модули в его подкаталоге gwyddion/modules.

Если не установлен, по умолчанию используется вкомпилированное значение ${libdir}, обычно установленное в /usr/local/lib или /usr/local/lib64.

GWYDDION_LIBEXECDIR Основной каталог lib-exec, куда были установлены подключаемые модули. Gwyddion ищет подключаемые модули в его подкаталоге gwyddion/plugins.

Если не установлено, по умолчанию используется вкомпилированное значение ${libexecdir} обычно установленное в /usr/local/libexec.

GWYDDION_LOCALEDIR Каталог данных о локализации, куда были установлены каталоги сообщений (переводы).

Если не установлен, по умолчанию используется вкомпилированное значение ${datadir}/locale обычно установленное в /usr/local/share/locale.

Другие переменные, которые влияют на поведение Gwyddion при запуске включают в себя переменные GLib+ и переменные Gtk+, а также некоторые специфичные для Gwyddion переменные:

GWYDDION_LOGFILE Имя файла, куда перенаправляются сообщения журналов. На MS Windows сообщения всегда отправляются в файл, поскольку работа с терминалом там весьма затруднительна. Местоположение журналов по умолчанию, gwyddion.log в каталоге пользователя внутри Documents and Settings (или Users), может быть переопределено с помощью переменной окружения GWYDDION_LOGFILE. На unix сообщения по умолчанию отправляются на терминал, и эта переменная будет действовать только при задании опции --log-to-file.

Если Gwyddion собран с поддержкой OpenMP, он использует распараллеливание вычислений (не все модули это поддерживают, но значительная часть да). Переменные окружения OpenMP такие, как OMP_NUM_THREADS можно использовать для его настройки.

Файлы

~/.gwyddion/settings Сохранённые пользовательские настройки и состояния инструментов. Не стоит редактировать при запущенном Gwyddion, он всё равно перезапишет этот файл при выходе.

~/.gwyddion/glmaterials, ~/.gwyddion/gradients, ... Пользовательские каталоги с различными ресурсами (материалами OpenGL, цветовыми градиентами, ...).

$GWYDDION_DATADIR/gwyddion/glmaterials, $GWYDDION_DATADIR/gwyddion/gradients ... То же самое для общесистемных ресурсов.

~/.gwyddion/pixmaps Каталог для пользовательских иконок. В основном полезно при установке модулей в домашний каталог.

$GWYDDION_DATADIR/gwyddion/pixmaps, То же самое для общесистемных иконок.

~/.gwyddion/modules Каталог для пользовательских модулей. Они должны находиться в подкаталогах file, graph, process, layer и tools в зависимости от их вида, хотя это больше традиция, чем обязательное правило.

$GWYDDION_LIBDIR/gwyddion/modules, То же самое для общесистемных модулей.

~/.gwyddion/plugins Каталог для пользовательских подключаемых модулей. Они должны находиться в подкаталогах file и process в зависимости от их вида.

$GWYDDION_LIBEXECDIR/gwyddion/plugins, То же самое для общесистемных подключаемых модулей.

~/.gwyddion/pygwy Каталог для пользовательских скриптов и модулей на python.

См. также

gwyddion-thumbnailer(1), gxsm(1)

5.2 gwyddion-thumbnailer

gwyddion-thumbnailer — Создаёт миниатюры для файлов данных СЗМ

Краткая справка

gwyddion-thumbnailer --version | --help

gwyddion-thumbnailer [ОПЦИЯ...] РЕЖИМ [АРГУМЕНТ...]

Описание

Gwyddion-thumbnailer создаёт миниатюрные изображения для файлов данных СЗМ (Сканирующей Зондовой Микроскопии). В зависимости от режима работы, описанного ниже, миниатюры записываются чтобы соответствовать различным стандартам рабочего стола, таким образом, что они могут отображаться в nautilus(1), thunar(1) и подобных менеджерах файлов.

Gwyddion-thumbnailer загружает и отображает файлы используя библиотеки и модули gwyddion(1), следовательно. он создаёт миниатюры для всех форматов файлов. поддерживаемые установленной версией Gwyddion. Также это означает использование настроек Gwyddion, т.е. градиента псевдоцвета используемого в Gwyddion и также на него оказывают влияние те же переменные окружения, что и на Gwyddion.

Информационные опции

--help Печатает краткую справку и завершает работу.

--version Печатает информацию о версии и завершает работу.

Опции создания миниатюр

--update Записывает миниатюры только если они ещё не созданы или кажутся устаревшими. По умолчанию, gwyddion-thumbnailer переписывает существующие миниатюры даже если они кажутся не устаревшими.

Режим

Доступно три режима создания миниатюр: gnome2, tms и kde4; и один специальный режим: check. Они описаны ниже.

Gnome 2

gwyddion-thumbnailer [ОПЦИЯ...] gnome2 MAX-SIZE INPUT-FILE OUTPUT-FILE

В режиме gnome2, gwyddion-thumbnailer создаёт миниатюрные изображения в PNG в соответствии со спецификациями на миниатюры Gnome. Используя соглашения из этих спецификаций, он должен запускаться как

```
gwyddion-thumbnailer gnome2 %s %i %o
```

Gwyddion устанавливает соответствующие схемы GConf и включает создание миниатюр для всех типов фалов, которые он поддерживает по умолчанию, так что обычно это должно просто работать и ничего не нужно настраивать вручную.

Миниатюры, созданные в режиме gnome2 идентичны миниатюрам созданным в режиме tms, включая все дополнительные блоки PNG (в том случае, если указан тот же MAX-SIZE, что и в режиме tms, конечно).

TMS

gwyddion-thumbnailer [ОПЦИЯ...] tms MAX-SIZE INPUT-FILE

В режиме tms gwyddion-thumbnailer создаёт миниатюры в соответствии с Thumbnail Managing Standard (стандартом управления миниатюрами). Аргумент MAX-SIZE должен быть равен 128 или normal (оба означают 128 точек) или 256 или large (обаз означают 256 пикселей).

Имя выходного файла не задаётся, поскольку оно описано в TMS. миниатюры помещаются в каталоги для нормальных (normal) или больших (large) в соответствии с заданным MAX-SIZE.

Этот режим также может быть полезен для создания партии миниатюр вручную. Например, чтобы создать их для всех файлов *.afm в каталоге scans и его подкаталогах можно запустить

```
find scans -type f -name '*.afm' -print0 \\
    | xargs -0 -n 1 gwyddion-thumbnailer --update tms normal
```

После этого можно сделать кофе, поскольку это займёт некоторое время.

KDE 4

gwyddion-thumbnailer kde4 MAX-SIZE INPUT-FILE

В режиме kde4, gwyddion-thumbnailer создаёт PNG-миниатюры которые затем передаются модулю KDE gwythumbcreato миниатюры, снова те же самые, что и в других режимах, записываются в стандартный вывод.

НЕ используйте этот режим из командной строки. Он документирован для полноты, однако, протокол обмена между gwythumbcreator и gwyddion-thumbnailer следует считать закрытым и он может поменяться в любое время.

Check

gwyddion-thumbnailer check INPUT-FILE

Режим check не предназначен для создания миниатюр. Вместо этого gwyddion-thumbnailer выводит информацию о доступных миниатюрах для INPUT-FILE и кешированных ошибках создания миниатюр отдельными приложениями, как описано в TMS.

Например, если миниатюра нормального размера есть и она не устарела, большой миниатюры не существует и была одна кешированная ошибка gnome-thumbnail-factory, вывод будет следующим:

```
File:    INPUT-FILE
URI:     file:///home/me/Pictures/naughty/broken-tip3/INPUT-FILE
Normal:  /home/me/.thumbnails/normal/MD5.png
         status: OK
Large:   /home/me/.thumbnails/large/MD5.png
         status: Thumbnail does not exist or stat() fails on it.
Failed:  /home/me/.thumbnails/fail/gnome-thumbnail-factory/MD5.png
```

URI - канонический URI входного файла, MD5 - шестнадцатиричное представление контрольной суммы MD5 URI, как предписывает TMS. Если не было кешированных ошибок, строки Failed не печатаются.

Эта функция может использоваться для проверки миниатюр любого типа, не обязательно созданных gwyddion или gwyddion-thumbnailer. В будущем, однако, может выводится ошибка если миниатюра не содержит специфичной для Gwyddion информации.

См. также

gwyddion(1),

5.3 Комбинации клавиш

Комбинация	Эквивалент меню	Контекст	Действие
F1		все окна	Открывает соответствующий раздел руководства пользователя в браузере.
Ctrl-Q	Файл → Выйти	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Выйти из Gwyddion.

Комбинация	Эквивалент меню	Контекст	Действие
Ctrl-O	Файл → Открыть	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Открыть файл данных.
Ctrl-S	Файл → Сохранить	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Сохранить текущие данные (будет предложено имя файла, если оно ещё не связано с данными).
Ctrl-Shift-S	Файл → Сохранить как	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Сохранить текущие данные под другим именем. Имя файла, связанного с данными будет изменено на другое.
Ctrl-W	Файл → Закрыть	любая разновидность окна данных (изображение, 3D, XYZ, объём, график), окно инструментов, браузер данных	Закрыть файл, содержащий текущие данные.
Ctrl-Shift-M	Файл → Объединить	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Добавить данные из файла к текущему файлу.
Ctrl-H	Файл → Последние файлы → Предыдущие документы	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Открыть окно просмотра предыдущих документов (или показать его окно поверх остальных, если оно уже открыто).

Комбинация	Эквивалент меню	Контекст	Действие
Ctrl-D	Сделать копию в браузере данных	любая разновидность окна данных (изображение, 3D, XYZ, объём, график), окно инструментов, браузер данных	Сделать дубликат данных в текущем окне как нового блока данных в том же файле.
Ctrl-Insert	Извлечь в новый файл в браузере данных	любая разновидность окна данных (изображение, 3D, XYZ, объём, график), окно инструментов, браузер данных	Создать новый файл, содержащий только текущий блок данных.
Ctrl-Delete	Удалить в браузере данных	любая разновидность окна данных (изображение, 3D, XYZ, объём, график), окно инструментов, браузер данных	Удалить текущий блок данных из файла
Ctrl-Z	Правка → Отменить	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Отменить последний шаг обработки, применённый к текущим данным.
Ctrl-Y	Правка → Повторить	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Повторить последний шаг обработки, применённый к текущим данным.
Ctrl-K	Правка → Удалить маску	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Удалить маску с текущего окна данных.

Комбинация	Эквивалент меню	Контекст	Действие
Ctrl-Shift-K	Правка → Удалить презентацию	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Удалить презентацию с текущего окна данных (изображения).
F3		окно данных, окно инструмента, окно инструментов	Показать окно инструментов, если оно скрыто. Скрыть окно инструментов если оно показывается.
Ctrl-Shift-B	Просмотр метаданных (в контекстном меню)	окно изображения, данных XYZ или объёмных данных	Показать окно просмотра метаданных для отображаемых данных.
+		любая разновидность окна данных (изображение, 3D, XYZ, объём, график)	Приблизить изображение в текущем окне данных.
=		любая разновидность окна данных (изображение, 3D, XYZ, объём, график)	Приблизить изображение в текущем окне данных.
-		любая разновидность окна данных (изображение, 3D, XYZ, объём, график)	Отодвинуть изображение в текущем окне данных.
Z		любая разновидность окна данных (изображение, 3D, XYZ, объём, график)	Масштабировать текущее окно данных до масштаба 1:1.

Комбинация	Эквивалент меню	Контекст	Действие
Ctrl-F	Обработка данных → Повторить последний	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Применить к текущим данным последнюю функцию обработки данных с использованными в последний раз параметрами. Обычно операция будет тихо и незаметно повторно применена к данным, но если данный шаг обработки невозможен без участия человека, будет показано диалоговое окно.
Ctrl-Shift-F	Обработка данных → Повторить с настройкой последний	окно инструментов, окно данных, окно трёхмерного просмотра, окно графика, окно инструмента	Показать ещё раз диалог параметров последней функции обработки данных. Если операция не требует установки параметров, она будет проведена незамедлительно.

Можно присвоить свои комбинации клавиш всем функциям в меню, также возможно вызывать инструменты комбинацией клавиш.

Чтобы изменить комбинацию клавиш для пункта меню просто нужно выбрать его с помощью мыши или клавиш-стрелок, нажать требуемую комбинацию клавиш, и она незамедлительно будет установлена. Комбинация клавиш должна быть или специальной клавишей, т.е. F3, или сочетанием, включающим модификаторы, т.е. Ctrl-Shift-D. Нельзя присваивать просто буквенно-цифровые клавиши, такие как Q.

Чтобы предотвратить случайное изменение комбинаций клавиш, они могут меняться только при включенной опции Правка → Комбинации клавиш. Изменения по умолчанию выключены, что рекомендуется делать при обычном использовании.

Все комбинации клавиш хранятся в файле ui/accel_map в каталоге пользователя, который обычно называется ~/.gwyddion (Unix) или Documents and Settings\gwyddion (MS Windows). Присвоить комбинации клавиш инструментам можно только путём редактирования этого файла. Каждая строка соответствует действию, вызываемому этой комбинацией клавиш. Например, строка для инструмента "Редактор маски" по умолчанию выглядит так:

```
; (gtk_accel_path "<tool>/GwyToolMaskEditor" "")
```

Точки с запятой обозначают комментарии, т.е. строки. начинающиеся с них будут неактивными. Следовательно, чтобы присвоить сочетание клавиш Ctrl-Shift-E инструменту "Редактор маски", удалите точку с запятой чтобы сделать эту строку активной и запишите своё сочетание клавиш в пустое место между кавычками:

```
(gtk_accel_path "<tool>/GwyToolMaskEditor" "<Control><Shift>e")
```

5.4 Поддерживаемые форматы файлов

Формат файлов	Расширения	Модуль	Чтение	Запись	Спектроскопия	Объём	Карта кривых
Текстовые данные Accurex II	.txt	accurexii-txt	Да	—	—	—	—
Спектроскопия AFM Workshop	.csv	afmw-spec	—	—	Да	—	—
AIST-NT	.aist	aistfile	Да	—	—	—	—
Данные Alicona Imaging AL3D	.al3d	alicona	Да	—	—	—	—
Ambios AMB	.amb	ambfile	Да[a]	—	—	—	—
Данные 1D профилометрии Ambios	.dat, .xml	ambprofile	Да	—	—	—	—
Analysis Studio XML	.axd, .axz	anasys_xml	Да	—	Да	—	—
Anfor SIF	.sif	andorsif	Да[a]	—	—	—	—
Anfatec	.par, .int	anfatec	Да	—	—	—	Да
A.P.E. Research DAX	.dax	apedaxfile	Да	—	—	—	—
A.P.E. Research APDT	.apdt	apedaxfile	Да	—	—	—	—
A.P.E. Research DAT	.dat	apefile	Да	—	—	—	—
Asylum Research ARDF	.ardf	ardf	Да	—	—	Да	—
Текстовая матрица значений данных	.txt	asciiexport	—	Да	—	—	—
Assing AFM	.afm	assing-afm	Да	Да	—	—	—
Attocube Systems ASC	.asc	attocube	Да	—	—	—	—
Image Metrology BCR, BCRF	.bcr, .bcrf	bcrfile	Да	—	—	—	—
Burleigh BII	.bii	burleigh_bii	Да	—	—	—	—

Формат файлов	Расширения	Модуль	Чтение	Запись	Спектроскопия	Объём	Карта кривых
Burleigh IMG v2.1	.img	burleigh	Да	—	—	—	—
Экспортированные данные Burleigh	.txt, .bin	burleigh_exp	Да	—	—	—	—
Данные интерферограмм Code V	.int	codevfile	Да	—	—	—	—
Createc DAT	.dat	createc	Да	—	—	—	—
Benyuan CSM	.csm	csmfile	Да	—	—	—	—
Данные профилометрии Dektak OPDx	.OPDx	dektakvca	Да	—	—	—	—
Данные профилометрии Dektak XML	.xml	dektakxml	Да	—	—	—	—
Veeco Dimension 3100D	.001, .002, etc.	dimensionfile	Да[a]	—	—	—	—
Данные TEM Digital Micrograph DM3	.dm3	dm3file	Да	—	—	—	—
Данные TEM Digital Micrograph DM4	.dm4	dm3file	Да	—	—	—	—
DME Rasterscope	.img	dmefile	Да	—	—	—	—
Данные простых дампов Gwyddion	.dump	dumbfile	Да	—	—	—	—
ECS	.img	ecsfile	Да	—	—	—	—
Данные профилометрии Evovis XML	.xml	evovisxml	Да	—	—	—	—
Nanosurf EZD, NID	.ezd, .nid	ezdfile	Да	—	—	—	—
FemtoScan SPM	.spm	femtoscan	Да	—	—	—	—
Текстовые данные FemtoScan	.txt	femtoscan-txt	Да[b]	—	—	—	—
Flexible Image Transport System (FITS)	.fits, .fit	fitsfile	Да	—	—	—	—

Формат файлов	Расширения	Модуль	Чтение	Запись	Спектроскопия	Объём	Карта кривых
Файл структурной сетки VTK	.vtk	formats3d	—	Да	—	—	—
PLY 3D Polygon File Format	.ply	formats3d	—	Да	—	—	—
3D геометрия Wavefront OBJ	.obj	formats3d	Да	Да	—	—	—
3D геометрия Object File Format	.off	formats3d	—	Да	—	—	—
3D геометрия Stereolitography STL (бинарный)	.stl	formats3d	Да	Да	—	—	—
Данные XYZ	.xyz, .dat	formats3d	Да	Да	—	—	—
DME GDEF	.gdf	gdeffile	Да	—	—	—	—
Простое поле Gwyddion	.gsf	gsffile	Да	Да	—	—	—
Родной формат Gwyddion	.gwy	gwyfile	Да	Да	Да	Да	—
Данные Gwyddion XYZ	.gxyzf	gxyzffile	Да	Да	—	—	—
Psi HDF4	.hdf	hdf4file	Да	—	—	—	—
Asylum Research Ergo HDF5	.h5	hdf5file	Да	—	—	—	—
Shilps Sciences Lucent HDF5	.h5	hdf5file	Да	—	Да	Да	Да
Generic HDF5 files	.h5	hdf5file	Да	—	—	—	—
Matlab MAT 7.x files	.mat	hdf5file	Да	—	—	—	—
Hitachi AFM	.afm	hitachi-afm	Да	—	—	—	—
Данные SEM Hitachi S-3700 и S-4800	.txt + image	hitachi-sem	Да	—	—	—	—
WaveMetrics IGOR binary wave v5	.ibw	igorfile	Да	Да	—	—	—
IntelliWave ESD	.esd	intelliwave	Да	—	—	—	—
Intematix SDF	.sdf	intematix	Да	—	—	—	—

Формат файлов	Расширения	Модуль	Чтение	Запись	Спектроскопия	Объём	Карта кривых
Формат передачи данных СЗМ ISO 28600:2011	.spm	iso28600	Да	Да	Ограничена[c]	—	—
JEOL	.tif	jeol	Да	—	—	—	—
Изображение JEOL TEM	.tif	jeoltem	Да[a]	—	—	—	—
JPK Instruments	.jpk, .jpk-qi-image, .jpk-force, .jpk-force-map, .jpk-qi-data	jpkscan	Да	—	Да	—	Да
JEOL JSPM	.tif	jspmfile	Да	—	—	—	—
Keyence profilometry VK3, VK4, VK6, VK7	.vk3, .vk4, .vk6, .vk7	keyence	Да	—	—	—	—
Файл данных Leica LIF	.lif	leica	Да	—	—	Да	—
Olympus LEXT 4000	.lext	lextfile	Да	—	—	—	—
Изображения SEM FEI Magellan	.tif	magellan	Да	—	—	—	—
MapVue	.map	mapvue	Да	—	—	—	—
Файлы Matlab MAT 5	.mat	matfile	Да	—	—	—	—
Zygo MetroPro DAT	.dat	metropro	Да	—	—	—	—
MicroProf TXT	.txt	microprof	Да	—	—	—	—
MicroProf FRT	.frt	microprof	Да	—	—	—	—
DME MIF	.mif	miffile	Да	—	—	—	—
Molecular Imaging MI	.mi	mifile	Да	—	Ограничена[c]	—	Да
Aarhus MUL	.mul	mulfile	Да	—	—	—	—
Nanoeducator	.mspm, .stm, .spm	nanoeducator	Да	—	Да	—	—
Nanomagnetics NMI	.nmi	nanomagnetics	Да	—	—	—	—
Nanonics NAN	.nan	nanonics	Да	—	—	—	—
Nanonis SXM	.sxm	nanonis	Да	—	—	—	—
Спектроскопия Nanonis STS	.dat	nanonis-spec	—	—	Да	—	—

Формат файлов	Расширения	Модуль	Чтение	Запись	Спектроскопия	Объём	Карта кривых
Nano-Solution/NanoObserver	.nao	nanoobserver	Да	—	Да	—	—
Nanoscan XML	.xml	nanoscan	Да	—	—	—	—
NanoScanTech	.nstdat	nanoscantech	Да	—	Да	Да	—
Veeco Nanoscope III	.spm, .001, .002, и т.д.	nanoscope	Да	—	Ограничена[c]	Да	Да
Veeco Nanoscope II	.001, .002, etc.	nanoscope-ii	Да	—	—	—	—
Профилометрия NanoSystem	.spm	nanosystemz	Да	—	—	—	—
Nanotop SPM	.spm	nanotop	Да	—	—	—	—
GSXM NetCDF	.nc	netcdf	Да	—	—	—	—
Данные профилей Nano Measuring Machine	.dsc + .dat	nmmxyz	Да[d]	—	—	—	—
Nova ASCII	.txt	nova-asc	Да	—	—	—	—
Последовательный двоичный массив numpy	.npy	npyfile	Да	—	—	—	—
Несколько последовательных двоичных массивов numpy	.npz	npyfile	Да	—	—	—	—
Nearly raw raster data (NRRD)	.nrrd	nrrdfile	Да[e]	Да[f]	—	Да	—
NT-MDT	.mdt	nt-mdt	Да	—	Да	Да	—
EM4SYS NX II	.bmp	nxiifile	Да	—	—	—	—
Olympus OIR	.oir	oirfile	Да	—	—	—	—
Olympus packed OIR	.poir	oirfile	Да	—	—	—	—
Старый формат MDA от NT-MDT	.sxml + .dat	oldmda	—	—	—	Да	—
Olympus LEXT 3000	.ols	ols	Да	—	—	—	—
Open Microscopy OME TIFF	.ome.tiff, .ome.tif	ometiff	Да	—	—	—	—
Omicron SCALA	.par + .tf*, .tb*, .sf*, .sb*	omicron	Да	—	Да	—	—
Формат Omicron flat	.*_flat	omicronflat	Да	—	—	—	—

Формат файлов	Расширения	Модуль	Чтение	Запись	Спектроскопия	Объём	Карта кривых
Omicron MATRIX	.mtrx	omicronmatrix	Да	—	Ограничена[c]	Да	—
Wyko OPD	.opd	opdfile	Да	—	—	—	—
Wyko ASCII	.asc	opdfile	Да	—	—	—	—
OpenGPS X3P (ISO 5436-2)	.x3p	opengps	Да	—	—	—	—
Данные ACM миссии к Марсу NASA Phoenix	.dat, .lbl + .tab	phoenix	Да	—	—	—	—
Изображения	.png, .jpeg, .tiff, .tga, .pnm, .bmp	pixmap	Да[g]	Да[h]	—	—	—
Nanosurf PLT	.plt	pltfile	Да	—	—	—	—
Pacific Nanotechnology PNI	.pni	pnifile	Да	—	—	—	—
SPE камеры Princeton Instruments	.spe	princetonspe	Да	—	—	—	—
Park Systems	.tiff, .tif	psia	Да	—	—	—	—
Park Systems PS-PPT	.ps-ppt	psppt	Да	—	—	—	Да
Данные SymPhoTime TTTR v2.0	.pt3	pt3file	Да	—	—	—	—
Quazar NPIC	.npic	quazarnpic	Да[a]	—	—	—	—
Quesant AFM	.afm	quesant	Да	—	—	—	—
Необработанные текстовые файлы	any	rawfile	Да	—	—	—	—
Необработанные двоичные данные	any	rawfile	Да	—	—	—	—
Текстовые данные графиков (необработанные)	any	rawgraph	Да[i]	—	—	—	—
Файл данных Renishaw WiRE	.wdf	renishaw	Да	—	Да	Да	—
RHK Instruments SM3	.sm3	rhk-sm3	Да	—	Ограничена[c]	—	—
RHK Instruments SM4	.sm4	rhk-sm4	Да	—	Ограничена[c]	—	—

Формат файлов	Расширения	Модуль	Чтение	Запись	Спектроскопия	Объём	Карта кривых
RHK Instruments SM2	.sm2	rhk-spm32	Да	—	Ограничена[c]	—	—
Automation and Robotics Dual Lens Mapper	.mcr, .mct, .mce	robotics	Да	—	—	—	—
Файлы S94 STM	.s94	s94file	Да	—	—	—	—
Файл данных поверхности Surfstand	.sdf	sdfile	Да	Да	—	—	—
Micromap SDFA	.sdfa	sdfile	Да	—	—	—	—
Seiko SII	.xqb, .xqd, .xqt, .xqp, .xqj, .xqi	seiko	Да	—	—	—	—
Sensofar PLu	.plu, .apx	sensofar	Да	—	—	—	—
Данные Sensofar PLUx	.plux	sensofarx	Да	—	—	—	—
Sensolytics DAT	.dat	sensolytics	Да	—	—	—	Да
Shimadzu	.sph, .spp, .001, .002, и т.п.	shimadzu	Да	—	—	—	—
Shimadzu ASCII	.txt	shimadzu	Да	—	—	—	—
IonScope SICM	.img	sicmfile	Да	—	—	—	—
Surface Imaging Systems	.sis	sis	Да	—	—	—	—
Файлы Thermo Fisher SPC	.spc	spcfile	—	—	Да	—	—
SPIP ASCII	.asc	spip-asc	Да	Да	—	—	—
Thermicroscopes SPMLab R4-R7	.tfr, .ffr, etc.	spmlab	Да	—	—	—	—
Thermicroscopes SPMLab, данные с плавающей точкой	.flt	spmlabf	Да	—	—	—	—
SPML (Scanning Probe Microscopy Markup Language)	.xml	spml	Да	—	—	—	—

Формат файлов	Расширения	Модуль	Чтение	Запись	Спектроскопия	Объём	Карта кривых
Данные АТС SPMxFormat	.spm	spmxfile	Да	—	—	—	—
Omicron STMPRG	tp*, ta*	stmprg	Да	—	—	—	—
Molecular Imaging STP	.stp	stpfile	Да	—	—	—	—
Surf	.sur	surffile	Да	—	—	—	—
Изображения SEM Tescan MIRA	.tif	tescan	Да	—	—	—	—
Изображения SEM Tescan LYRA	.hdr + .png	tescan	Да	—	—	—	—
Данные FEI Tecnai imaging and analysis (бывший Emispec)	.ser	tiaser	Да	—	Да	Да	—
Данные топографии Corning Tropel UltraSort	.ttf	ttffile	Да	—	—	—	—
Экспортированные в CSV данные Corning Tropel	.csv	ttffile	Да	—	—	—	—
Unisoku	.hdr + .dat	unisoku	Да	—	—	—	—
Данные WinSTM	.stm	win_stm	Да	—	—	—	—
Данные WITec Project	.wip	wipfile	Да	—	Да	Да	—
Экспорт в ASCII WITec	.dat	witec-asc	Да	—	—	—	—
WITec	.wit	witfile	Да	—	—	—	—
Department of Nanometrology, WRUST	.dat	wrustfile	Да	—	—	—	—
Данные AFM Workshop	.wsf	wsffile	Да	—	—	—	—
Nanotec WSxM	.tom, .top, .stp	wsxmfile	Да	Да	—	—	—
Кривые Nanotec WSxM	.cur	wsxmfile	Да	—	—	—	—
Сканы SEM Carl Zeiss	.tif	zeiss	Да	—	—	—	—

Формат файлов	Расширения	Модуль	Чтение	Запись	Спектроскопия	Объём	Карта кривых
Изображения CLSM Carl Zeiss	.lsm	zeisslsm	Да	—	—	Да	—
Данные искривления сетки Zemax	.dat	zemax	Да	—	—	—	—
Данные профилометрии KLA Zeta	.zmg	zmgfile	Да	—	—	—	—
Данные Keyence ZON	.zon	zonfile	Да	—	—	—	—
Изображения OpenEXR	.exr	hdrimage	Да	Да	—	—	—

[a] Модуль импорта не закончен вследствие отсутствия документации, тестовых файлов и/или людей, готовых помочь с тестированием. Если у вас есть возможность помочь, свяжитесь с нами.

[b] Предполагается семплирование с регулярным интервалом в обоих направлениях (X и Y).

[c] Кривые спектров импортируются как графики, информация о позиции теряется.

[d] Данные XYZ интерполируются на правильную сетку при импорте.

[e] Не все варианты реализованы.

[f] Данные экспортируются в фиксированный присоединённый формат с плавающей точкой с родным порядком следования байтов для данной архитектуры.

[g] Поддержка импорта основана на Gdk-Pixbuf и, следовательно, может меняться от системы к системе.

[h] Обычно с потерями, предназначено для демонстрационных целей. 16битный экспорт в градациях серого возможен в PNG, TIFF и PNM.

[i] В настоящее время поддерживаются только простые данные в две колонки, импортируемые как кривые графиков.

5.5 Форматы изображений с большой глубиной цвета

Gwyddion может экспортировать данные в 16битные изображения в градациях серого в форматах PNG, PNM и TIFF и в формат OpenEXR в варианте типа данных с плавающей точкой половинной и одинарной точности и 32битным целым типом. В случае 16битных изображений полный диапазон значений данных растягивается на всю шкалу серого; OpenEXR позволяет указать множитель масштабирования значений.

Когда данные экспортируются в изображения с большой глубиной цвета, в файл сохраняется дополнительная информация чтобы его можно было автоматически загрузить обратно в Gwyddion не задавая вручную размеры и масштабы. Если добавить эту дополнительную информацию к файлам изображений, которые создаются другими программами, можно сделать их загружаемыми напрямую в Gwyddion с корректными размерами и масштабами. Информация организована в виде пар ключ-значение, сохранённых используя индивидуальные для каждого формата способы, описанные в следующей таблице.

Формат	Метод
PNG	блоки tEXt
OpenEXR	именованные аттрибуты
PNM	комментарии заголовка в форме # ключ: значение

Большая часть ключей идентична тем. что используются в файлах Gwyddion с простым полем, за исключением добавленных префиксов Gwy::, поэтому дополнительная информация доступна в описании GSF. Значения с

плавающей точкой сохраняются напрямую, если формат это позволяет (OpenEXR), либо используется текстовое представление данных (в C-формате). Ключи перечислены ниже.

Ключ	Тип	Значение
Gwy::XReal	с плавающей точкой	Горизонтальный размер в физических единицах (заданных XYUnits), положительное число с плавающей точкой.
Gwy::YReal	с плавающей точкой	Вертикальный размер в физических единицах (заданных XYUnits), положительное число с плавающей точкой.
Gwy::XOffset	с плавающей точкой	Горизонтальное смещение в физических единицах (заданных XYUnits).
Gwy::YOffset	с плавающей точкой	Вертикальное смещение в физических единицах (заданных XYUnits).
Gwy::ZScale	с плавающей точкой	Множитель масштабирования значений. Данные изображения должны быть умножены на этот множитель чтобы получить физические значения. Этот параметр обычно используется в форматах с плавающей точкой с ограниченным диапазоном значений, например, с половинной точностью. Для целочисленных данных обычно используются Gwy::ZMin и Gwy::ZMax.
Gwy::ZMin	с плавающей точкой	Значение в физических единицах, соответствующее минимальному значению, представленному на изображении (обычно 0).
Gwy::ZMax	с плавающей точкой	Значение в физических единицах, соответствующее максимальному значению, представленному на изображении.
Gwy::XYUnits	строка	Горизонтальные единицы измерения, т.е. единицы физических размеров и смещений.
Gwy::ZUnits	строка	Единицы значений, т.е. единицы измерения значений данных.
Gwy::Title	строка	Заголовок канала/данных.

В случае PNG, информация о масштабировании также сохраняется в стандартных блоках sCAL и pCAL (с линейной формулой масштабирования). И наоборот, если эти блоки присутствуют (и отсутствуют специфичные для Gwyddion), информация оттуда используется при импорте. См. спецификацию формата PNG для описания этих блоков.

5.6 Выражения

Выражения, используемые в модуле «арифметика над данными», формулах величин зёрен и в аппроксимирующих функциях графиков, имеют синтаксис подобный многим языкам программирования.

Все числа являются действительными (с плавающей точкой), числовые константы используют стандартную нотацию. Примеры правильных чисел: 1, .707, 2.661, 8.2e-34.

Имена функций, постоянных и переменных начинаются с буквы и продолжаются нулём или более букв, цифр и знаков подчёркивания. Примеры правильных идентификаторов: pow10 (функция), Pi (постоянная), d2_2 (переменная).

Приоритет операций сведён в нижеприведённую таблицу.

Операция	Ассоциативность	Примеры
скобки	недоступно	(x)
вызовы функций и унарные операторы	справа налево	-sqrt 3
оператор степени	справа налево	2^16
операторы умножения, деления, остатка от деления	слева направо	9/2 * 8
операторы сложения и вычитания	слева направо	3 - 4 + 5

Следует заметить, что -3^2 равно 9, и равносильно (-3)^2, как в bc, но в отличие от Perl или Python.

Доступные операторы и функции сведены в нижеследующую таблицу.

Оператор	Смысл
+ (унарный)	нет операции
- (унарный)	отрицательное значение
~	отрицательное значение (эквивалентно -)
+ (бинарный)	сложение
- (бинарный)	вычитание
*	умножение
/	деление
%	остаток с плавающей точкой
^	степень
abs	модуль
floor	округление вниз к ближайшему целому (отбрасывание дробной части)
ceil	округление вверх до ближайшего целого (следующего после вещественного)
sqrt	квадратный корень
cbrt	корень кубический
sin	функция синуса
cos	функция косинуса
tan	функция тангенса
asin	функция арксинуса
acos	функция арккосинуса
atan	функция арктангенса
sinc	функция "кардинальный синус", синус делённый на значение
exp	функция экспоненты по основанию e
ln	функция логарифма по основанию e
log	функция логарифма по основанию e
pow10	степенная функция по основанию 10
log10	функция логарифма по основанию 10
pow2	функция экспоненты по основанию 2
log2	функция логарифма по основанию 2
spow	функция степени со знаком; результат будет иметь тот же знак, что и аргумент
sinh	функция гиперболического синуса
cosh	функция гиперболического косинуса
tanh	функция гиперболического тангенса
asinh	инверсия функции гиперболического синуса
acosh	инверсия функции гиперболического косинуса
atanh	инверсия функции гиперболического тангенса
pow	функция степени, pow(x,y) соответствует x^y
min	минимум двух значений
max	максимум двух значений
step	нуль для отрицательных чисел или нуля, один для положительных значений
mod	остаток от деления с плавающей точкой, mod(x,y) эквивалентен x % y
hypot	Эвклидова функция расстояния, hypot(x,y) соответствует sqrt(x^2+y^2)
atan2	функция арктангенса двух переменных

Следующие функции будут доступны если системная математическая библиотека их содержит:

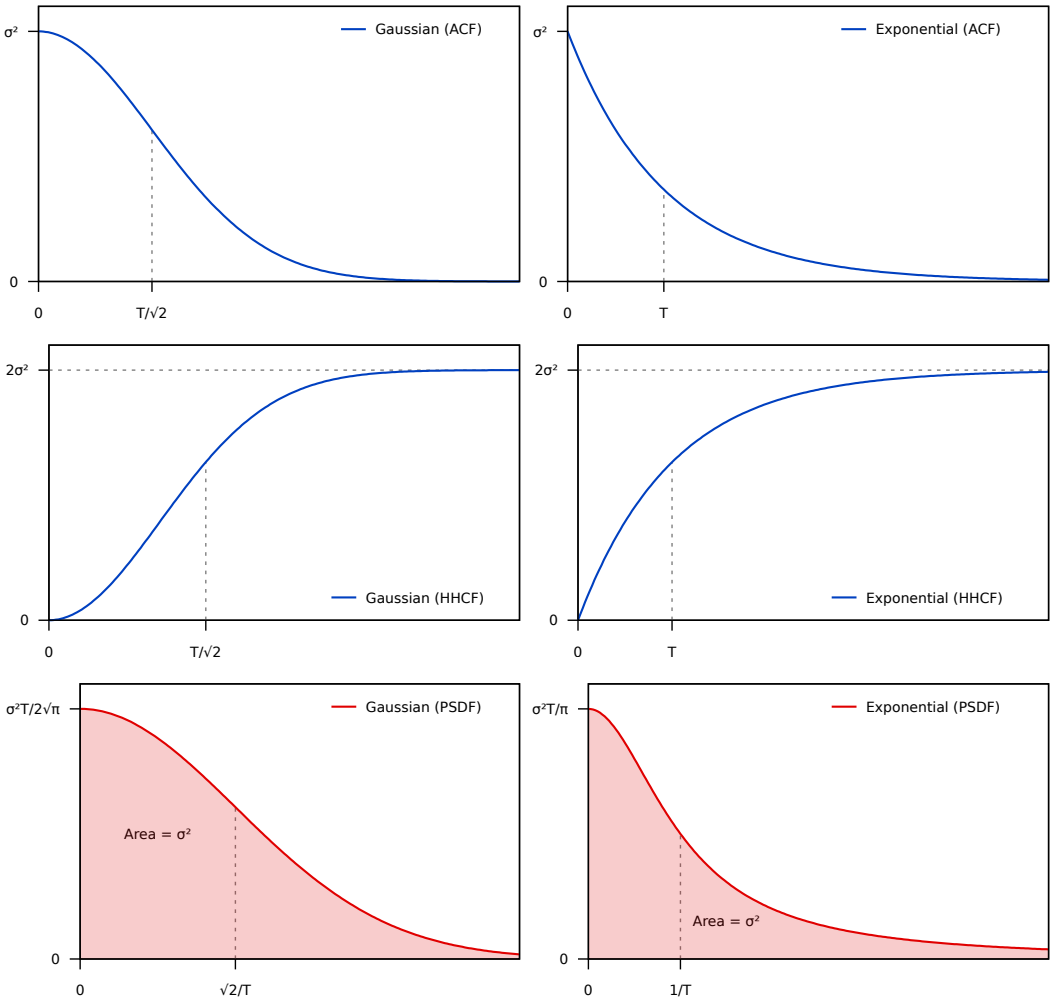
Оператор	Смысл
erf	функция ошибки (интеграл гауссовой функции от нуля)
erfc	дополнительная функция ошибки (интеграл гауссовой функции до бесконечности)
lGamma	логарифм функции Γ
Gamma	функция Γ
J0	функция Бесселя первого рода порядка 0
J1	функция Бесселя первого рода порядка 1
Y0	функция Бесселя второго рода порядка 0
Y1	функция Бесселя второго рода порядка 1

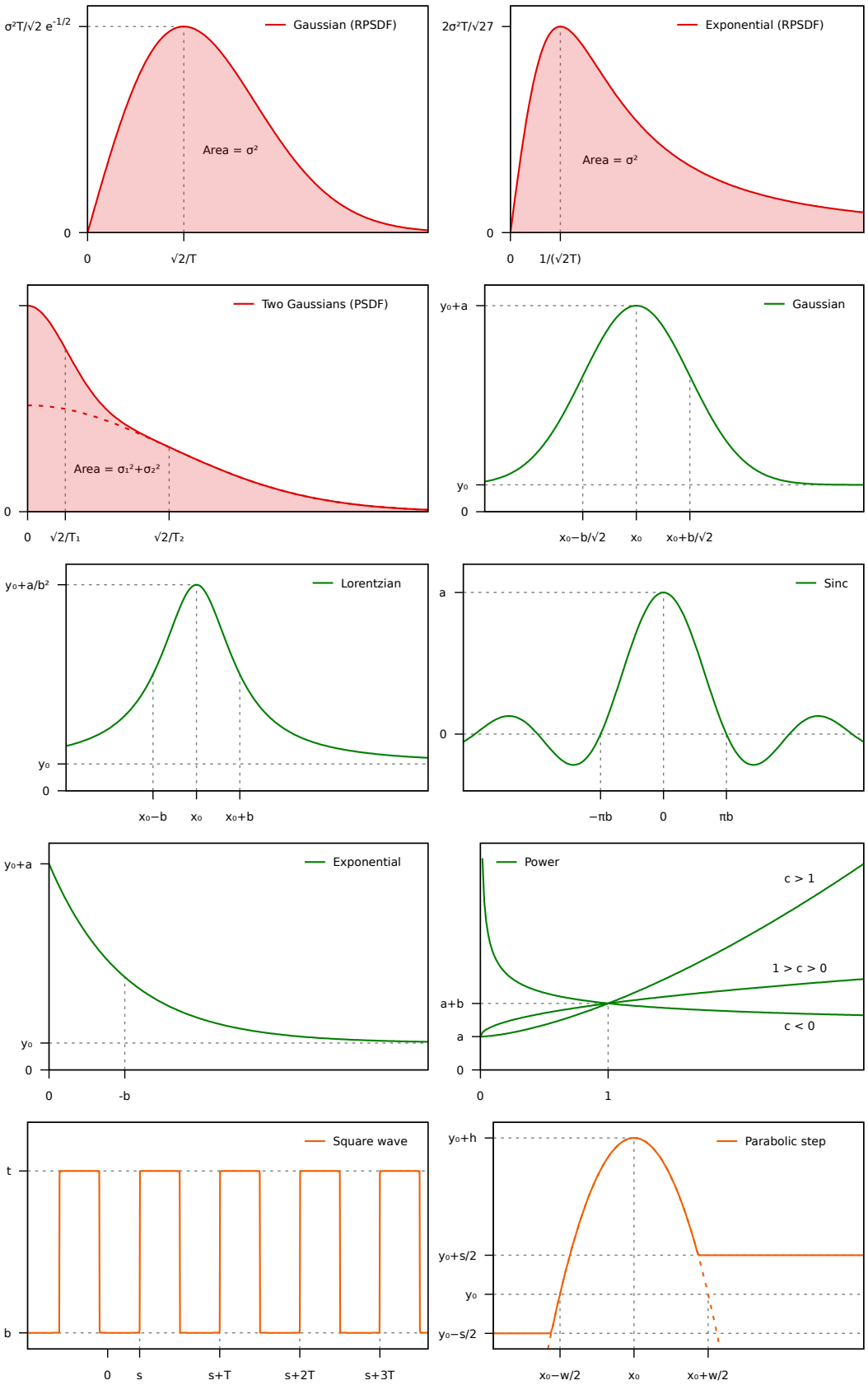
Помимо этого, есть несколько особенностей, которые упрощают набор простых выражений:

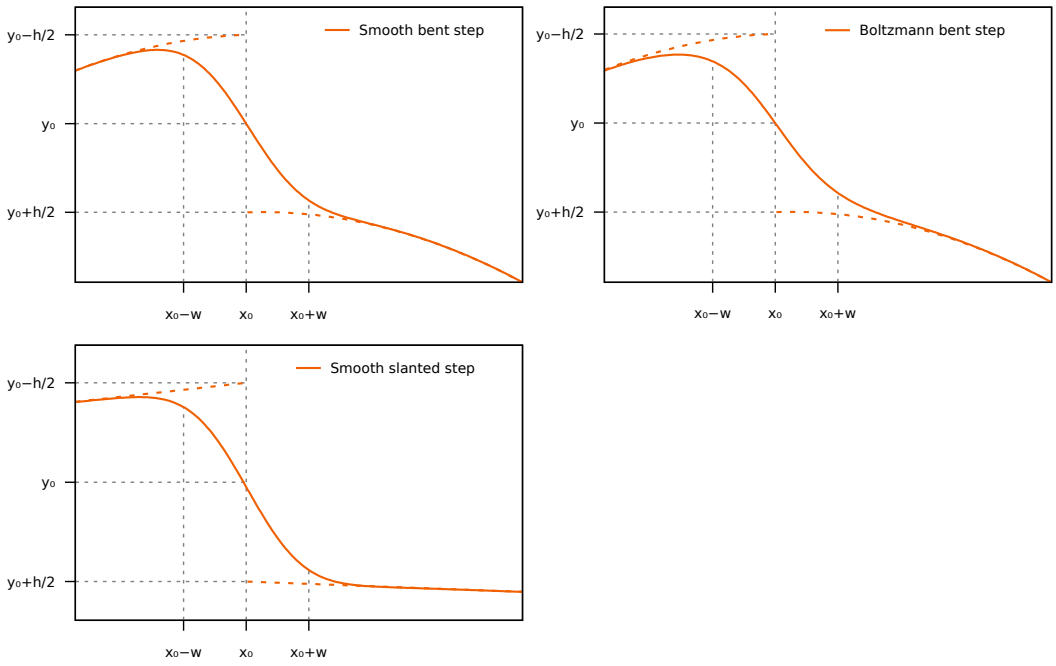
- Знака умножения являются опциональными, вместо них можно использовать пробелы (или в некоторых случаях ничего не ставить). Например, 3/4 Pi и 5(4+3)(2+1) будут правильными выражениями. Однако, 3a не будет, 3e-4 всегда обозначает 0.0003, а не 3*e - 4.
- Между вызовом функций и унарными операторами нет отличий, поэтому скобки нередко могут опускаться. Например, sqrt 5 и hypot hypot 3,4,5 будут правильными выражениями. Последнее можно расписать со скобками следующим образом: hypot(hypot(3,4),5).
  Следует однако отметить, что вызов функции имеет больший приоритет, чем любой другой оператор, поэтому sin Pi/2 будет эквивалентом (sin Pi)/2, а не sin(Pi/2).

Если сомневаетесь, то пишите выражения в их полной форме.

5.7 Аппроксимирующие функции




Gaussian (RPSDF)
σ²T/√2 e^-1/2
Area = σ²
0
0
√2/T
Exponential (RPSDF)
2σ²T/√27
Area = σ²
0
0
1/(√2T)
Two Gaussians (PSDF)
Area = σ₁²+σ₂²
0
0
√2/T₁
√2/T₂
Gaussian
y₀+a
y₀
0
x₀−b/√2
x₀
x₀+b/√2
Lorentzian
y₀+a/b²
y₀
0
x₀−b
x₀
x₀+b
Sinc
a
0
−πb
0
πb
Exponential
y₀+a
y₀
0
0
-b
Power
c > 1
1 > c > 0
c < 0
a+b
a
0
0
1
Square wave
t
b
0
s
s+T
s+2T
s+3T
Parabolic step
y₀+h
y₀+s/2
y₀
y₀−s/2
x₀−w/2
x₀
x₀+w/2



5.8 Аппроксимация 3D форм

Многие трёхмерные геометрические формы могут быть аппроксимированы функциями Аппроксимация формы для изображений и данных XYZ, которые имеют общие параметры. Следовательно, мы сначала опишем общие для них параметры и отдельно затем перечислим особые параметры в описаниях отдельных аппроксимирующих геометрических форм.

Основные общие параметры

x_0 Горизонтальное положение центра фигуры, обычно совпадает с вершиной (или самой нижней точкой для фигур с отрицательной высотой). Для периодических форм это смещение относительно начала координат одной из бесконечного множества фигур.

y_0 Вертикальное положение центра фигуры, обычно совпадает с вершиной (или самой нижней точкой для фигур с отрицательной высотой). Для периодических форм это смещение относительно начала координат одной из бесконечного множества фигур.

z_0 Высота базовой плоскости (в центре фигуры, если базовая плоскость наклонена). Следует заметить, что этот параметр может показывать 100% корреляцию с другими параметрами, относящимися к высоте, если фигура занимает всё изображение и базовая плоскость не видна.

h Высота фигуры по отношению к горизонтальной базовой плоскости.

φ Вращение в положительном направлении по отношению к основной системе координат, в которой обычно главные оси фигуры выровнены горизонтально и вертикально.

Общие параметры для выступов

b_x Наклон базовой плоскости в горизонтальном направлении.

b_y Наклон базовой плоскости в вертикальном направлении.

a Параметр анизотропии. Он равен отношению более длинной и более короткой сторон (или полуосей или других размерностей ширины) фигуры. Следовательно, одна из сторон будет равна средней ширине, умноженной на $\sqrt{a}$, а другая средней ширине, делённой на $\sqrt{a}$. Зафиксируйте его равным единице если фигура не должна растягиваться в одном направлении и сжиматься в другом.

Выступающие фигуры имеют параметры базовой плоскости b_x и b_y, а также обычно какой-то параметр, описывающий размер фигуры в основании. Если на изображении представлена только вершина, их значения будут неопределёнными или они перестают быть независимыми. Это может приводить к тому, что аппроксимация начнёт плохо сходиться или закончится ошибкой. Значения параметров надо в этом случае исправить.

Общие параметры для сглаженных выступов

Сглаженные гауссовой функцией выступы – конусы и пирамиды – имеют следующие два общих параметра:

R радиус кривизны на острие.

α Тангенс наклона боковой стороны.

Общие параметры для выступов

h Высота выступа по отношению к горизонтальной базовой плоскости.

δ Гладкость, которая определяет ширину грани в форме функции ошибки между нижней и верхней плоскостями.

Общие параметры для периодических форм

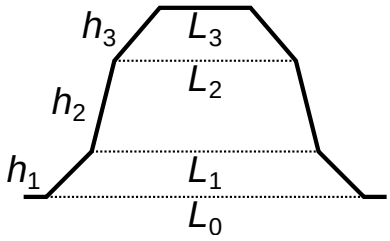
L Период, т.е. то расстояние, после которого форма начинает повторяться.

p Покрытие, т.е. часть плоскости, на которой присутствует какая-либо фигура, а не базовая плоскость.

Особые параметры

Решетка (простая) содержит только один дополнительный параметр, который задаёт её форму, c. Гребень имеет форму срезанного гиперболического косинуса, где малое значение c соответствует параболическому сечению, в то время, как большое значение c соответствует острому, почти прямоугольному сечению.

Решетка (трёхуровневая) имеет сечение в форме трёх трапециоидов поставленных друг на друга. Соответствующие три параметра высоты h_1, h_2 и h_3 определяют высоту каждого из них. Соответствующие параметры уменьшения толщины q_1, q_2 и q_3 задают насколько толщина верхнего основания соответствующего трапециоида уменьшается по отношению к нижнему (на множитель $1/(1+q_i)$). Также нередко полезно взглянуть на производные величины L_0, L_1, L_2 и L_3, которые напрямую равны ширинам и производную величину h равную общей высоте.



Ширины и высоты трапециоидов, формирующих профиль трёхуровневой решетки. Следует отметить, что ширины это производные параметры, напрямую не аппроксимирующие.

Отверстия имеют параметры s, который задаёт конусность отверстия вследствие наклонных боковых граней, и r, который задаёт кривизну скривления углов. Для обоих параметров нули соответствуют идеальной прямоугольной форме.

Параболическое кольцо является трёхмерной симметричной относительно вращения версией функции аппроксимации Параболическая ступень и управляется в точности теми же самыми параметрами формы.

Сфера имеет только один параметр формы C, задающий кривизну. Радиус доступен в качестве производной величины.

Цилиндр (лежащий) также имеет параметр кривизны C. В дополнение он имеет параметр наклона $b_{\|}$, задающий наклон базовой плоскости вдоль оси цилиндра.

Гауссиана имеет параметр среднего среднеквадратичного отклонения σ_{mean}. Для анизотропных гауссиан он равен геометрическому среднему двух ширин в ортогональных направлениях, доступных в качестве производных величин.

Лоренцева форма имеет параметр полуширины на половине высоты β_{mean}. Для анизотропных лоренцевых функций он равен геометрическому среднему двух ширин в ортогональных направлениях, доступных в качестве производных величин.

Конус имеет параметр R, который определяет радиус конуса у основания.

Пирамида (алмазоподобная) и Пирамида (трёхгранная) имеют параметр L, который определяет длину её стороны (вдоль основания). Поскольку основной ориентацией пирамиды является диагональная, все четыре стороны всё равно будут иметь одинаковую длину даже если параметр анизотропии a не равен единице.

Ступень (двусторонняя) имеет параметр w, который задаёт ширину ступени.

5.9 Ресурсы

Некоторые небольшие блоки данных, например, карты псевдоцвета или предустановки импорта необработанных данных, сохраняются в отдельных файлах, которые все вместе называются файлами ресурсов. Gwyddion ищет ресурсы в двух разных местах: системном и индивидуальном для данного пользователя.

Системные ресурсы устанавливаются вместе с программой и их нельзя менять. Обычно они расположены в каталоге вроде /usr/share/gwyddion (Unix), Program Files\Gwyddion (MS Windows) или другом, который определяется GWYDDION_DATADIR.

Ресурсы пользователя расположены в его каталоге. Это обычно ~/.gwyddion (Unix) или Documents and Settings\gwyddion (MS Windows).

Все файлы ресурсов являются простыми текстовыми файлами которые могут легко быть прочитаны и изменены текстовым редактором или пересланы другим пользователям (если они скопированы или отредактированы вручную, необходимо перезапустить Gwyddion чтобы он их заметил). В большинстве случаев в файлах могут быть только символы ASCII. Если там допустим международный текст, то он должен быть в кодировке UTF-8. Численные значения представлены в стандартном формате POSIX, т.е. с десятичной точкой независимо от того, какой разделитель обычно используется в языке пользователя.

Ресурсы упорядочены в подкаталогах в соответствии с их типом, т.е. градиенты псевдоцвета находятся в подкаталоге gradients. Имя файла определяет название ресурса – градиент Gray находится в файле gradients/Gray. Модули могут определять свои собственные имена ресурсов; описанные здесь типы наиболее важны, но их список может быть неполон.

Каждый файл ресурсов имеет одну и ту же структуру. Он начинается со строки, определяющей тип ресурса :

```
Gwyddion resource GwyGradient
```

где GwyGradient – имя типа в системе типов (что является достаточно низкоуровневой подробностью, но так обстоит дело), за которой следуют именованные параметры в форме

```
<i>имя</i> <i>значение</i>
```

и данные ресурса. Некоторые ресурсы могут содержать только именованные параметры, другие только данные.

Градиенты

Градиенты. т.е. карты псевдоцвета, находятся в каталоге gradients, они определяются типом GwyGradient и содержат только данные. Они могут быть отредактированы в программе с использованием редактора градиентов.

Данные градиента состоят из строк, соответствующих отдельным точкам градиента:

```
<i>положение</i> <i>красный</i> <i>зелёный</i> <i>синий</i> <i>альфа</i>
```

Положение определяет, где цвет, заданный с помощью четырёх составляющих красный, зелёный, синий и альфа будет находиться на отрезке $[0,1]$, где 0 соответствует началу отрезка (и градиента), а 1 его концу. Цвет интерполируется линейно между заданными точками.

Положения должны образовывать растущую последовательность от 0 до 1 (т.е. минимальное число точек цвета – 2). Диапазон компонентов цвета также $[0,1]$. Следует отметить, что значение альфа, соответствующее непрозрачности не используется и должно быть задано как 1 (полностью непрозрачному).

Например, стандартный градиент Red переходящий от чёрного (0 0 0) к красному (1 0 0) и затем к белому (1 1 1) определяется следующим образом:

```
Gwyddion resource GwyGradient
0.0 0 0 0 1
0.5 1 0 0 1
1.0 1 1 1 1
```

Материалы OpenGL

Материалы OpenGL находятся в каталоге glmaterials, определяются по типу GwyGLMaterial и содержат только данные. Они могут редактироваться в программе с использованием редактора материалов OpenGL.

Данные материала состоят из четырёх строк RGBA, подобно градиентам, которые соответствуют четырём компонентам материала OpenGL в следующем порядке:

1. окружающий,
2. рассеянный,
3. отраженный,
4. излучаемый.

См. раздел Редактор материалов OpenGL, где описаны отдельные компоненты. За ними следует строка, содержащая значение блеска как число из интервала $[0, 1]$.

Следует отметить, что компонент, отвечающий за излучение, хоть он и пишется и читается в Gwyddion, но на текущий момент не используется для трёхмерного просмотра. Рекомендуется установить его в 0 0 0 1, т.е. чёрный.

Например, стандартный материал Red-Rubber с очень тёмным красным цветом окружающего света, серым диффузным рассеянием, красным зеркальным отражением и низким значением блеска определяется следующим образом:

```
Gwyddion resource GwyGLMaterial
0.05 0.0  0.0  1.0
0.5  0.4  0.4  1.0
0.7  0.04 0.04 1.0
0.0  0.0  0.0  1.0
.078125
```

Значения зёрен

Значения зёрен находятся в каталоге grainvalues, определяются типом GwyGrainValue и содержат только именованные параметры. Они могут использоваться для определения дополнительных величин зёрен, которые появляются в группе Пользовательские в функциях анализа зёрен. В то время, когда этот текст пишется, в программе нет редактора для этих величин и их нужно создавать вручную.

Именованные параметры сведены в следующую таблицу:

Параметр	Необходимо	Тип	Описание
symbol	необходимо	идентификатор	Идентификатор, чтобы использовать в других выражениях (но см. ниже). Он должен быть правильным идентификатором, состоящим из букв латинского алфавита ASCII, чисел и знаков подчёркивания, начинающихся с буквы.
expression	необходимо	свободная форма	Формула для расчёта этой величины из других величин зёрен. Общий синтаксис выражений описан в разделе Выражения.
symbol_markup	опционально	свободная форма	Специальные строки, которые могут включать в себя греческие буквы, надстрочные и подстрочные символы могут быть описаны языком разметки Pango. Это используется для представления в программе и, хотя это является опциональным, рекомендуется хотя бы объявлять его так же, как и symbol.
power_xy	опционально	целое	Степень, в которой латеральный размер входит в величину. Например, эта величина равна 1 для размеров зёрен, 2 для площадей и объёмов. Значение по умолчанию 0.

Параметр	Необходимо	Тип	Описание
power_z	опционально	целое	Степень, в которой размерность «высоты» входит в величину. Например, равно 1 для значений и объёмов, 0 для размеров в плоскости и площадей. Значение по умолчанию 0.
same_units	опционально	0 или 1	Устанавливается в 1, если величина имеет смысл только если пространственные размеры и «высоты» являются одинаковыми физическими величинами. Например, это требуется для площади поверхности. Значение по умолчанию 0.
is_angle	опционально	0 или 1	Устанавливается в 1, если величина является углом. Выражение должно рассчитывать углы в радианах. Однако, если задана переменная is_angle, Gwyddion будет знать что значение можно перевести в градусы для представления его пользователю. Значение по умолчанию 0.

В настоящее время заданные пользователем величины зёрен не могут использовать другие заданные пользователем величины зёрен чтобы избежать круговых зависимостей. Встроенные величины зёрен перечислены ниже:

Символ	Группа	Название
x_c	Положение	Положение центра по x
y_c	Положение	Положение центра по y
z_min	Value	Минимальное значение
z_max	Value	Максимальное значение
z_m	Value	Среднее значение
z_med	Value	Срединное значение
z_rms	Value	Среднеквадратичное значение
b_min	Value	Минимальное значение на границе
b_max	Value	Максимальное значение на границе
A_px	Площадь	Площадь в пикселях
A_0	Площадь	Площадь проекции
A_s	Площадь	Площадь поверхности
a_eq	Площадь	Сторона эквивалентного квадрата
r_eq	Площадь	Радиус эквивалентного диска
A_h	Площадь	Площадь выше половинной высоты
A_c	Площадь	Площадь выпуклой оболочки
V_0	Объём	Объём между нулевой плоскостью и поверхностью
V_min	Объём	Объём между поверхностью и плоскостью, проходящей через минимум зерна
V_L	Объём	Объём между поверхностью и фоном, вычисленным по Лапласу
L_b0	Граница	Длина границы проекции
D_min	Граница	Минимальный ограничивающий размер
phi_min	Граница	Направление минимального ограничивающего размера
D_max	Граница	Максимальный ограничивающий размер
phi_max	Граница	Направление максимального ограничивающего размера
R_i	Граница	Максимальный радиус вписанного диска
x_i	Граница	Положение центра по x максимального вписанного диска
y_i	Граница	Положение центра по y максимального вписанного диска
R_e	Граница	Минимальный радиус описанной окружности
x_e	Граница	Положение центра по x минимальной описанной окружности
y_e	Граница	Положение центра по y минимальной описанной окружности
R_m	Граница	Средний радиус
M_min	Граница	Минимальный диаметр Мартина
omega_min	Граница	Направление минимального диаметра Мартина
M_max	Граница	Максимальный диаметр Мартина
omega_max	Граница	Направление максимального диаметра Мартина
theta	Уклон	Наклон ϑ
phi	Уклон	Наклон φ
x_0	Кривизна	Положение центра кривизны по x
y_0	Кривизна	Положение центра кривизны по y
z_m	Кривизна	Значение z центра кривизны
kappa_1	Кривизна	Кривизна 1
kappa_2	Кривизна	Кривизна 2
phi_1	Кривизна	Угол кривизны 1
phi_2	Кривизна	Угол кривизны 2
a_e1	Момент	Большая полуось эквивалентного эллипса
a_e2	Момент	Малая полуось эквивалентного эллипса
phi_e1	Момент	Ориентация эквивалентного эллипса

Например, новая величина зёрен Height, измеряющая высоту зерна как разность между его максимальным и минимальным значением, может быть задана следующим образом:

```
Gwyddion resource GwyGrainValue
symbol dz
symbol_markup Δz
power_xy 0
power_z 1
expression z_max - z_min
```

Предустановки импорта необработанных файлов

Предустановки импорта необработанных файлов хранятся в каталоге rawfile, они определяются типом GwyRawFilePreset и содержат только именованные параметры. Они обычно создаются и изменяются в редакторе предустановок в модуле импорта необработанных файлов.

Именованные параметры в файлах ресурсов близко соответствуют параметрам интерфейса пользователя, описанным в деталях в разделе Импорт необработанных файлов данных. Следовательно, здесь они будут описаны только кратко.

Параметр	Тип	Описание
xres, yres	целое	горизонтальный и вертикальный размер
xreal, yreal	число	физические размеры в единицах, заданных xyexponent и xyunit
xyexponent	кратное трём	степень 10, на которую нужно умножить xreal и yreal
xyunit	строка	основные единицы измерения xreal и yreal, т.е. "m"
zscale	число	шаг единиц в значениях
zexponent	кратное трём	степень 10, на которую нужно умножить zscale
zunit	строка	основные единицы zscale
havemissing	0 или 1	0 означает что обработка отсутствующих значений отключена, 1 что включе
missingvalue	число	специальное замещающее значение, которое обозначает отсутствие данных
формат	0 или 1	0 означает двоичный, 1 - текстовый
builtin (двоичный)	целое	встроенный идентификатор формата данных, см. ниже
offset (двоичный)	целое	смещение данных в файле, в байтах
size (двоичный)	целое	размер значения данных, в байтах
skip (двоичный)	целое	число бит, которое нужно пропустить после каждого значения
rowskip (двоичный)	целое	число дополнительных бит, которое нужно пропустить после каждой строки
sign (двоичный)	0 или 1	0 означает без знака, 1 - со знаком
revsample (двоичный)	0 или 1	1 означает инверсию битов в значениях
revbyte (двоичный)	0 или 1	1 означает обратный порядок бит в байтах
byteswap (двоичный)	целое	шаблон замены байтов
lineoffset (текстовый)	целое	число строк, которые нужно пропустить перед чтением данных
skipfields (текстовый)	целое	число полей, которое нужно пропустить вначале каждой строки
delimiter (текстовый)	строка	разделитель полей, пустая строка означает произвольный пробельный симво
decomma (текстовый)	0 или 1	1 если десятичный разделитель запятая, 0 для точки

Следует отметить. что при выборе встроенного двоичного формата, т.е. ненулевой переменной builtin, означает двоичный формат до некоторой степени. Это означает. что опции size, revbyte и sign игнорируются, поскольку они используются только для подробного задания пользовательских форматов. Доступные форматы перечислены в нижеприведённой таблице:

Тип	Описание
0	Определённый пользователем
1	8-битное целое со знаком
2	8-битное целое без знака
3	16-битное целое со знаком
4	16-битное целое без знака
5	32-битное целое со знаком
6	32-битное целое без знака
7	IEEE float (число с плавающей точкой, одинарной точности)
8	IEEE double (число с плавающей точкой с двойной точностью)
9	64-битное целое со знаком
10	64-битное целое без знака

5.10 Настройки

Функции модулей в Gwyddion запоминают значения параметров между вызовами и между сеансами работы с программой. Место хранения этих параметров называется настройками. Настройки также содержат некоторое количество параметров, относящихся к основной программе.

Постоянным хранилищем настроек является файл settings в каталоге пользователя, что обычно означает каталог ~/.gwyddion (в Unix) или Documents and Settings\gwyddion (в MS Windows). Этот файл читается только при старте программы и записывается при завершении её работы. Следует иметь это в виду если вы собираетесь исправить что-то в нём вручную. Неизвестные настройки в этом файле игнорируются, но сохраняются.

Файл настроек начинается с магической строки заголовка

```
Gwyddion Settings 1.0
```

за которой следуют строки с отдельными параметрами и значениями (которые формируют, технически, переведённый в последовательный вид GwyContainer). Gwyddion записывает элементы в алфавитном порядке, но это не является обязательным требованием и вам не нужно сохранять этот порядок при модификации файла.

Каждая строка параметров записывается в форме

```
"key" type value
```

Типичные ключи настроек модуля начинаются с /module/modulename, хотя в некоторых случаях часть имени модуля не является по сути именем, либо потому что несколько модулей разделяют общие настройки, либо по причинам исторического характера. Ключи настройки самой программы начинаются с /app/. Все возможные типы значений перечислены в следующей таблице.

Тип	Описание
boolean	Логическое значение, может быть либо True, либо False.
char	Один символ. Обычные символы представлены напрямую одним символом. Специальные символы представлены в шестнадцатеричной нотации как 0xXX. Этот тип параметров практически не используется в модулях.
int32	32битное целое со знаком. Gwyddion записывает их в десятичной нотации, но читает также другие виды, например, шестнадцатеричную.
int64	64битное целое со знаком. Gwyddion записывает их в десятичной нотации, но читает также другие виды, например, шестнадцатеричную.
double	Число с плавающей точкой. Может быть в научном представлении, т.е. 1.23e-4. Они представлены в стандартной локали C/POSIX, т.е. десятичным разделителем является точка (а не запятая или что-нибудь другое).

Тип	Описание
string	Строка символов в двойных кавычках, в общем случае в кодировке UTF-8. Специальные символы, включая вложенные двойные кавычки, экранируются используя стандартную нотацию с обратной чертой.

Некоторые потенциально полезные общепрограммные настройки, которые можно изменить в файле настроек:

Ключ	Тип	Описание
/app/restore-tool-position	boolean	Если установлено в True, Gwyddion восстанавливает не только размеры диалогов инструментов, но и их размещение на экране (если это получается). Для хороших оконных менеджеров это скорей раздражает, чем помогает, но в MS Windows может оказаться полезным включить эту настройку.
/app/3d/axes/disable	boolean	Если установлено в True, подписи осей не будут рисоваться в окнах трёхмерного просмотра OpenGL, даже если они включены. Это может помочь с некоторыми проблемными комбинациями видеодрайвера/видеокарты/GtkGLExt, с которыми Gwyddion падает при попытке отрисовки этих осей.
/app/help/user-guide-base	string	Место размещения руководства пользователя для работы справочной системы. Если не задано, будет использоваться значение по умолчанию, указывающее на онлайновую версию, т.е., нечто вроде "https://gwyddion.net/documentation/user-guide-en", в зависисмости от языка. Если вы хотите использовать локальную версию руководства пользователя в формате HTML, установите это значение в название каталога, например, "/home/yeti/docs/gwyddion-user-guide-xhtml-en-2014-09-17".

5.11 Настройка панели инструментов

Нижняя часть окна инструментов, содержащая кнопки для вызова функций и инструментов может быть модифицирована не выходя из программы с использованием редактора инструментов, вызываемого из меню Правка → Панель инструментов.

Также можно настроить эту панель с помощью редактирования файла ui/toolbox.xml. Этот же файл можно перенести на другую учётную запись пользователя или другую машину, если вы хотите скопировать туда конфигурацию панели инструментов. По аналогии с настройкой комбинаций клавиш, файл должен находиться в домашнем каталоге пользователя, что обычно подразумевает ~/.gwyddion (в Unix) или Documents and Settings\gwyddion (в MS Windows). Хорошим примером для начальной настройки может служить файл с настройками по умолчанию ui/toolbox.xml, который устанавливается в share/gwyddion.

Число кнопок в ряду регулируется атрибутом width элемента верхнего уровня toolbox. Чтобы изменить его на пять просто замените начало файла на

```
<toolbox width='5'>
```

Расширяемые и сжимаемые группы кнопок, такие как Обработка данных или Инструменты создаются тегом group. Можно создать столько групп, сколько нужно. Функции различных типов можно собирать в одну группу по желанию. Каждая группа должна быть снабжена уникальным атрибутом id, который, кроме всего прочего, используется для запоминания какая из групп была свёрнута, а какая развёрнута. Атрибуттitle задаёт название группы:

```
<group id='proc' title='Data Process' translatable='yes'>
```

Группы могут иметь опциональный атрибут translatable, который задаёт, что заголовок группы должен быть переведён. Наиболее полезен этот атрибут для групп, присутствующих в панели инструментов по умолчанию. Когда вы добавляете свои новые группы, вы вероятно уже задаёте им имена на предпочитаемом языке.

Отдельные кнопки создаются с помощью элементов item:

```
<item type='proc' function='align_rows' icon='gwy_line_level' run='non-interactive'/>
```

Каждый такое элемент должен содержать атрибут type, определяющий тип функции. Если тип функции не является пустым — 'empty', элемент также должен содержать атрибут function, задающий определённую функцию. Имена функций можно найти в окне просмотра модулей (Информация → Просмотр модулей), где они перечислены в списке Зарегистрированные функции для каждого модуля; или в онлайновом браузере модулей. Доступные типы функций перечислены в следующей таблице:

Имя типа	Тип функции
empty	Пустой заполнитель, который можно использовать для разделения или выравнивания строк.
builtin	Встроенные функции, которые включают приближение, удаление, активацию режима 3D-просмотра. Всего их ровно четыре: 'display_3d', 'zoom_in', 'zoom_out' и 'zoom_1_1'.
proc	Функции обработки двумерных данных (изображений). Они имеют префикс proc:: в окне просмотра модулей.
graph	Функции обработки графиков. Они имеют префикс graph:: в окне просмотра модулей.
volume	Функции обработки объёмных данных. Они имеют префикс volume:: в окне просмотра модулей.
xyz	Функции обработки данных XYZ. Они имеют префикс xyz:: в окне просмотра модулей.
tool	Инструменты. Они имеют префикс tool:: в окне просмотра модулей.

Функции обработки данных (включая обработку объёмных данных и данных XYZ) опционально могут иметь атрибут run который задаёт режим вызова функции. Если он установлен в non-interactive, функция будет вызвана немедленно, не показывая никаких диалоговых окон с параметрами (подобно тому, как нажатие Ctrl-F запускает последнюю использовавшуюся функцию обработки данных). Другой режим это interactive, который в общем случае не задаётся, поскольку является режимом по умолчанию. Следует отметить, что не для всех функций доступны оба режима: некоторые простые функции не требуют взаимодействия с пользователем, некоторые другие не работают без участия пользователя.

Изображение на кнопке задаётся атрибутом icon. Некоторые функции модулей уже содержат заданные изображения (которые не нужно указывать вручную), но этот список довольно ограничен в силу огромного количества доступных функций. Можно использовать изображения из коллекций Gwyddion stock icon и Gtk+ stock icon. Следует отметить, что названия изображений в коллекции Gwyddion используют символ подчёркивания для связывания отдельных слов, иконки Gtk+ используют тире.

Если предложенного набора изображений недостаточно, чтобы выбрать нужное, можно нарисовать свою иконку и поместить её в ~/.gwyddion/pixmaps (или эквивалентное место в других операционных системах), используя то же соглашение о наименовании элементов, что и иконки в Gwyddion. Может быть полезно начать с исходных файлов GIMP XCF для иконок, поскольку они уже содержат отдельные элементы, которые можно смешивать и использовать друг с другом. Если у вас получилась красивая иконка, её разумеется можно прислать для включения в состав Gwyddion.

Поскольку инструменты доступны только из окна инструментов, не указание их в ui/toolbox.xml делает их полностью недоступными. Следовательно, специальный пустой элемент

```
<item type='tool'/>
```

можно использовать для размещения всех инструментов, которые ещё не перемещены в заданную позицию (в достаточно произвольном порядке).

5.12 Формат файлов Gwyddion

Файл данных собственного формата Gwyddion (GWY) состоит из древовидной структуры объектов, переведённых в последовательный вид. В общем случае эти объекты могут быть различного вида и включать в себя другие объекты (вследствие древовидной структуры). В понимании работы может сильно помочь gwydump, простой демонстратор структуры файла, который доступен на сайте проекта, если с ним поработать какое-то время и посмотреть содержимое различных файлов. Если вы планируете читать и/или писать файлы GWY в другом программном обеспечении, можно также взглянуть на libgwyfile, небольшую самостоятельную встраиваемую библиотеку для работы с файлами GWY.

Два слоя

Это описание формата файла задаёт на самом деле две различные вещи, которые иногда полезно различать:

- Физическое представление файлов: порядок байтов, типы данных и их представление, как определяются размеры различных частей блока данных, как объекты с данными представляются в виде вложенного дерева, и т.д. Называется общий формат файла GWY в libgwyfile. Можно использовать этот формат для чего-то полностью отличающегося от данных СЗМ в каком-то совершенно другом программном обеспечении – и всё равно это будет называться формат файла GWY.
- Представление конкретных данных СЗМ в Gwyddion, задающее дальнейшие условия поверх физической структуры и интерпретации. Например, мы описываем, что изображения сохраняются как объекты, называемые GwyDataField, в которых разрешения сохраняются таким образом, данные изображения сохраняются таким образом, и т.д. В libgwyfile это называется формат файла Gwyddion GWY.

Обычно должно быть достаточно понятно, когда мы говорим об общем формате, и когда о специфичных для Gwyddion объектах данных (иногда это будет явно указано). Мы начнём с физической структуры файла.

Порядок байтов

Все данные хранятся в формате младший байт сначала (little-endian, также известный как LSB или Intel).

Заголовок файла

Заголовок файла состоит из четырёх байтов (магическое число) со значениями символов ASCII GWYP.

Это новый формат файла, также существует более старая версия формата с заголовком GWYO. Она не будет здесь обсуждаться, поскольку в настоящее время практически перестала использоваться.

Данные файла

Остальная часть файла Gwyddion состоит из переведённых в последовательную форму (сериализованных) объектов GwyContainer, которые содержат все данные. Они сохраняются точно так же, как и любые другие объекты, что описано в следующей секции.

В общем случае файл GWY может содержать какой-то другой объект в качестве объекта верхнего уровня.

Размещение объекта

Объект состоит из трёх частей (в следующем порядке):

1. Имя типа, сохранённое в виде завершенной NUL строки символов ASCII. Это имя типа в системе типов GObject. В общем случае имя должно быть правильным идентификатором языка C.
2. Размер переведённых в последовательную форму данных в виде 32-битного целого без знака. Не включает в себя размер имени типа и размер себя.
3. Список компонентов. Компоненты — это именованные части данных объекта, каждая из которых относится к определенному типу данных: атомарному типу, массиву атомарных типов или снова объекту. Они хранятся в произвольном порядке, и программы чтения файлов не должны предполагать какой-либо определенный порядок компонентов.

Число компонент в явном виде не хранится, оно подразумевается общим размером данных, переведённых в последовательную форму. Компоненты занимают вместе ровно столько байтов, выравнивание не используется.

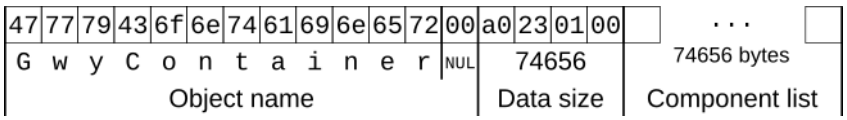


Схема размещения объекта на примере GwyContainer.

Компоненты

Каждый компонент состоит из трёх частей (в следующем порядке):

1. Имя, сохраненное в виде завершенной NUL строки в кодировке UTF-8.

2. Тип, сохранённый как один байт без знака (символ). Таблица возможных типов компонент представлена ниже.
3. Данные, сохранённые в формате, который подходит для определённого типа.

Компоненты нередко называются элементы (items) в libgwyfile и библиотеках Gwyddion.

Размер компонента не представлен в явном виде – он задается его типом данных и содержимым. Пропуск неизвестного (или не интересующего нас) компонента в процессе чтения файла GWY может быть реализован тем, что сначала читается имя компонента и его тип. После это есть несколько возможных сценариев:

- Если тип является атомарным и имеет фиксированный размер число байт, которые нужно пропустить, задаёт таблица типов.
- Для строк необходимо пропустить после завершающего символа NUL.
- Если тип является объектом, необходимо прочесть его имя и размер, и размер тогда говорит сколько байт нужно пропустить дальше.
- Если тип это массив простых атомарных типов, тогда необходимо прочитать длину массива и затем умножить размер атомарного типа на длину. Это даёт число байт, которое необходимо пропустить.
- Для массива строк, необходимо прочитать длину массива и повторить пропуск строки (перемещение за NUL) в соответствии с длиной массива.
- Наконец, наиболее сложный сценарий это массив объектов, где нужно прочесть длину массива и затем повторить пропуск объекта заданное число раз.

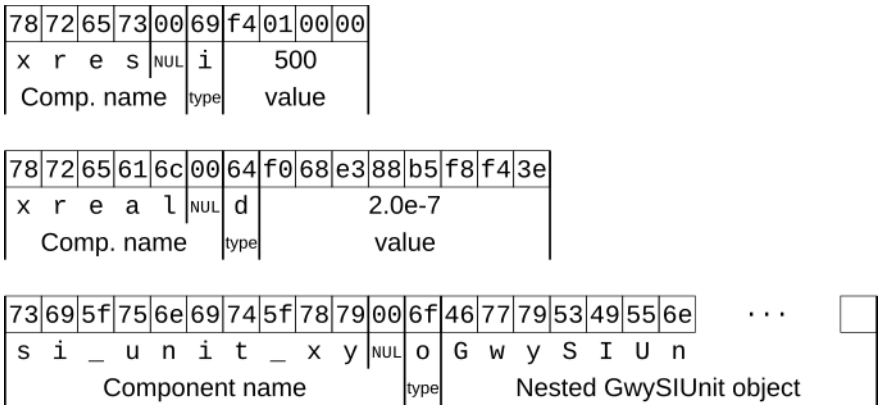


Иллюстрация представления трёх компонент, целочисленного xres, с плавающей точкой xreal и вложенного объекта si_unit_xy. Они просто будут следовать друг за другом в файле.

Типы данных

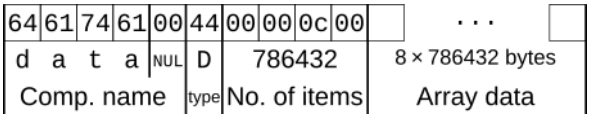
Доступные атомарные типы данных приведены в нижеследующей таблице:

Тип	Символ	Размер	Примечание
булев	b	1 байт	Ноль это false, не ноль (обычно 1) это true
символ	c	1 байт	
32битное целое	i	4 байта	
64битное целое	q	8 байт	
вещественное двойной точности	d	8 байт	Конечное число с плавающей точкой двойной точности по стандарту IEEE 754, т.е. файлы не должны содержать бесконечных чисел и нечисловых значений (NaN).
строка	s	переменный	NUL-завершенная и кодированная в UTF-8
объект	o	переменный	Вложенный переведённый в последовательную форму объект, как описано выше

Каждый атомарный тип, кроме булевого (boolean) имеет своего двойника в виде массива. Символ типа для всех массивов тот же, что и для атомарного типа, только он написан в верхнем регистре. Массивы хранятся как

32-битная длина массива без знака (число элементов), затем значения элементов. Число элементов должно быть положительным, пустые массивы не сохраняются. Список типов данных для массивов приведён в следующей таблице:

Тип	Символ	Примечание
массив символов	C	В общем случае ни NUL-завершенная, ни кодированная в UTF-8 (s используется для текстовых строк).
массив 32битных целых	I	
массив 64битных целых	Q	
массив вещественных чисел двойной точности	D	
массив строк	S	
массив объектов	O	Буква O в верхнем регистре, не ноль



Размещение компонентов массива показано для массива чисел типа double названного data.

GwyContainer верхнего уровня

GwyContainer это общий похожий на словарь объект данных который может содержать произвольные компоненты произвольных типов. Это позволяет достаточно разумно включать непредусмотренные заранее структуры данных в файлы GWY.

Имена (ключи) объектов в GwyContainer, представляющем файл Gwyddion GWY сильно напоминают имена файлов в UNIX, т.е. они записываются в виде разделённых символом / путей и образуют похожую на древовидную структуру. Например, название первого изображения, под номером 0, сохраняется с ключом /0/data/title. Следует отметить, что некоторые данные и дополнительная информация сохраняются под ключами с нелогичными названиями, обычно это происходит по историческим причинам.

Следующие разделы описывают организацию интересующик нас данных и информации в GwyContainer верхнего уровня. Этот список не обязательно будет полным. Однако, поскольку все элементы данных в файле единообразно указывают свои имена, тип и размер в байтах всегда можно пропустить неизвестные типы данных или те типы данных, которые не нужны, и извлекать только требуемые.

Изображения

Следующая таблица содержит общие ключи данных, относящихся к изображениям в контейнере верхнего уровня для изображения номер 0. Для других изображений число 0 должно быть заменено на соответствующий номер изображения. Следует отметить, что изображения нередко нумеруются последовательно начиная с 0. Однако, они могут иметь любые номера и множество номеров изображений не обязательно должно быть последовательно и непрерывно.

Ключ	Тип	Значение
/0/data	GwyDataField	Данные канала.
/0/data/title	строка	Имя канала, как оно показывается в просмотре данных
/0/data/visible	булев	Должно ли изображение показываться в окне при открытии файла данных
/0/data/realsquare	булев	Должно ли изображение показываться в окне в режиме Равные масштабы осей (или, наоборот, в режиме Квадратные пиксели).

Ключ	Тип	Значение
/0/base/palette	строка	Имя градиента псевдоцвета используемого при отображении изображения.
/0/base/range-type	32битное целое	Тип отображения псевдоцвета (как задано инструментом диапазон псевдоцвета), значение из множества GwyLayerBasicRangeType.
/0/base/min	вещественное двойной точности	Минимальное значение для заданного пользователем отображаемого диапазона.
/0/base/max	вещественное двойной точности	Максимальное значение для заданного пользователем отображаемого диапазона.
/0/mask	GwyDataField	Данные маски. Размеры в пикселях этого поля данных должны соответствовать данным изображения.
/0/mask/red	вещественное двойной точности	Красный компонент цвета маски.
/0/mask/green	вещественное двойной точности	Зелёный компонент цвета маски.
/0/mask/blue	вещественное двойной точности	Синий компонент цвета маски.
/0/mask/alpha	вещественное двойной точности	Компонент Alpha (прозрачность) цвета маски.
/0/show	GwyDataField	Данные презентации. Размеры в пикселях этого поля данных должны соответствовать данным изображения.
/0/meta	GwyContainer	Метаданные канала. Ключи это имена, которые будут отображаться в окне просмотра метаданных, строковые значения – значения данных.
/0/data/log	GwyStringList	Журнал работы с каналом. Он имеет формат тип::function(param=value, ...)@time.
/0/select/foo	подкласс GwySelection	Данные выделенных объектов. Каждый тип выделения имеет (обычно) отдельный тип объекта и сохраняется под отдельным именем; конкретное имя foo будет тем же, что показано в менеджер выделенного.

Каналы представлены как объекты GwyDataField. Компоненты GwyDataField представлены в следующей таблице:

Компонент	Тип	Значение
xres	32битное целое	Горизонтальный размер в пикселях.
yres	32битное целое	Вертикальный размер в пикселях.
xreal	вещественное двойной точности	Горизонтальный размер в физических единицах.
yreal	вещественное двойной точности	Вертикальный размер в физических единицах.
xoff	вещественное двойной точности	Горизонтальное смещение верхнего левого угла в физических единицах. Обычно записывается только если не равно нулю.
yoff	вещественное двойной точности	Вертикальное смещение верхнего левого угла в физических единицах. Обычно записывается только если не равно нулю.
si_unit_xy	GwySIUnit	Единица измерения горизонтальных размеров.
si_unit_z	GwySIUnit	Единица измерения значений данных.
data	массив вещественных чисел двойной точности	Данные поля, сохранённые как плоский массив размера xres×yres, сверху вниз и слева направо.

Графики

Следующая таблица содержит общие ключи данных, относящихся к графикам в контейнере верхнего уровня для графика номер 1. Для других графиков число 1 должно быть заменено на соответствующий номер графика. Следует отметить, что графики нередко нумеруются последовательно начиная с единицы, но они могут иметь любые положительные номера, не обязательно последовательные. Число 0 в префиксе номеров графика является историческим артефактом, ничего сейчас не значит и всегда должно быть 0.

Ключ	Тип	Значение
/0/graph/graph/1	GwyGraphModel	Данные объекта Graph model
/0/graph/graph/1/visible	булев	Должен ли график отображаться при открытии файла.

Графики представлены как объекты GwyGraphModel. Компоненты GwyGraphModel сведены в следующую таблицу:

Компонент	Тип	Значение
curves	массив из GwyGraphCurveModel	Отдельные кривые графиков.
title	строка	Название графика как оно отображается в окне просмотра данных.
x_unit	GwySIUnit	Единицы абсциссы.
y_unit	GwySIUnit	Единицы ординаты.
top_label	строка	Подпись верхней оси.
bottom_label	строка	Подпись нижней оси.
left_label	строка	Подпись левой оси.
right_label	строка	Подпись правой оси.
x_is_logarithmic	булев	Логарифмический масштаб абсциссы.
y_is_logarithmic	булев	Логарифмический масштаб ординаты.
x_min	вещественное двойной точности	Заданное пользователем минимальное значение абсциссы.
x_min_set	булев	Нужно ли использовать заданное пользователем минимальное значение абсциссы (или диапазон определяется автоматически).
x_max	вещественное двойной точности	Заданное пользователем максимальное значение абсциссы.
x_max_set	булев	Нужно ли использовать заданное пользователем максимальное значение абсциссы (или диапазон определяется автоматически).
y_min	вещественное двойной точности	Заданное пользователем минимальное значение ординаты.
y_min_set	булев	Нужно ли использовать заданное пользователем минимальное значение ординаты (или диапазон определяется автоматически).
y_max	вещественное двойной точности	Заданное пользователем максимальное значение ординаты.
y_max_set	булев	Нужно ли использовать заданное пользователем максимальное значение ординаты (или диапазон определяется автоматически).
grid-type	32битное целое	Тип отображаемой сетки. Значение из множества GwyGraphGridType.
label.has_frame	булев	Отображать рамку вокруг легенды.
label.frame_thickness	32битное целое	Толщина рамки легенды.

Компонент	Тип	Значение
label.reverse	булев	Отображать легенду в обратном порядке.
label.visible	булев	нужно ли отображать легенду.
label.position	32битное целое	Расположение (угол) в котором будет помещена легенда. Значение из множества GwyGraphLabelPosition.

Кривые графиков представлены как объекты GwyGraphCurveModel. Компоненты GwyGraphCurveModel сведены в следующую таблицу:

Компонент	Тип	Значение
xdata	массив вещественных чисел двойной точности	Точки абсциссы. Число точек должно соответствовать ydata.
ydata	массив вещественных чисел двойной точности	Точки ординаты. Число точек должно соответствовать xdata.
description	строка	Описание кривой (имя).
тип	32битное целое	Режим отображения кривой (точки, линии и т.п.) Значение из множества GwyGraphCurveType.
color.red	вещественное двойной точности	Красный компонент цвета кривой.
color.green	вещественное двойной точности	Зелёный компонент цвета кривой.
color.blue	вещественное двойной точности	Синий компонент цвета кривой.
point_type	32битное целое	Тип символов, представляющих точки данных. Значение из множества GwyGraphPointType.
point_size	32битное целое	Размер символов, представляющих точки данных.
line_type	32битное целое	Тип линий, соединяющих точки данных. Значение из множества GwyGraphLineType.
line_size	32битное целое	Толщина линии, соединяющей точки данных.

Спектры

Следующая таблица содержит общие ключи данных, относящихся к спектроскопии в контейнере верхнего уровня для набора спектров номер 0. Для других спектров число 0 надо заменить соответствующим номером набора спектров. Следует отметить. что наборы спектров нередко нумеруются последовательно начиная с 0, хотя они могут иметь любые номера, которые не обязательно должны идти последовательно.

Ключ	Тип	Значение
/sps/0	GwySpectra	Данные спектроскопии.

Наборы спектров одного типа представлены как объекты GwySpectra. Компоненты GwySpectra сведены в следующую таблицу:

Компонент	Тип	Значение
title	строка	Название спектров как оно отображается в окне просмотра данных.
si_unit_xy	GwySIUnit	Единицы измерения координат места, где снимались спектры.

Компонент	Тип	Значение
coords	массив вещественных чисел двойной точности	Координаты точек, где снимались спектры, в физических единицах. Каждый спектр занимает два элемента: горизонтальную и вертикальную координату. Количество координат должно соответствовать числу кривых в data.
data	массив из GwyDataLine	Отдельные кривые спектров.
selected	массив 32битных целых	Индексы выбранных кривых спектров.

Отдельные кривые в спектрах представлены как объекты GwyDataLine. Объект GwyDataLine является одномерным аналогом GwyDataField и используется также для других одномерных данных. Компоненты GwyDataLine сведены в следующую таблицу:

Компонент	Тип	Значение
res	32битное целое	Число точек данных.
real	вещественное двойной точности	Длина в физических единицах.
off	вещественное двойной точности	Смещение начала в физических единицах. Обычно записывается только если не равно нулю.
si_unit_x	GwySIUnit	Единицы измерения абсциссы.
si_unit_y	GwySIUnit	Единица измерения значений данных.
data	массив вещественных чисел двойной точности	Данные линии, сохранённые как массив res, слева направо .

Объёмные данные

Следующая таблица сводит воедино общие ключи для объёмных данных в контейнере верхнего уровня для объёмных данных с номером 0. Для других объёмных данных, число 0 должно быть заменено соответствующим номером объёмных данных. Следует отметить, что объёмные данные обычно нумеруются последовательно, начиная с 0, однако, они могут иметь любые номера и множество номеров объёмных данных не обязательно должно быть непрерывным.

Ключ	Тип	Значение
/brick/0	GwyBrick	Объёмные данные.
/brick/0/preview	GwyDataField	Двумерные данные, демонстрируемые при показе объёмных данных в окне.
/brick/0/title	строка	Имя объёмных данных, как оно показывается в браузере данных
/brick/0/visible	булев	Следует ли отображать объёмные данные в окне при загрузке файлов.
/brick/0/preview/palette	строка	Имя градиента псевдоцвета используемого при отображении изображения предпросмотра.
/brick/0/meta	GwyContainer	Метаданные объёмных данных. Ключи это имена, которые будут отображаться в окне просмотра метаданных, строковые значения – значения данных.
/brick/0/log	GwyStringList	Журнал работы с объёмными данными. Он имеет формат тип::function(param=value, . . .)@time.

Объёмные данные представлены как объекты GwyBrick. Компоненты GwyBrick представлены в следующей таблице:

Компонент	Тип	Значение
xres	32битное целое	Горизонтальный размер в пикселях.
yres	32битное целое	Вертикальный размер в пикселях.
zres	32битное целое	Глубина (число уровней) в пикселях.
xreal	вещественное двойной точности	Горизонтальный размер в физических единицах.
yreal	вещественное двойной точности	Вертикальный размер в физических единицах.
zreal	вещественное двойной точности	Размер глубины в физических единицах.
xoff	вещественное двойной точности	Горизонтальное смещение верхнего левого угла в физических единицах. Обычно записывается только если не равно нулю.
yoff	вещественное двойной точности	Вертикальное смещение верхнего левого угла в физических единицах. Обычно записывается только если не равно нулю.
zoff	вещественное двойной точности	Смещение по глубине верхнего левого угла в физических единицах. Обычно записывается только если не равно нулю.
si_unit_x	GwySIUnit	Единица измерения горизонтальных размеров.
si_unit_y	GwySIUnit	Единица измерения вертикальных пространственных размеров.
si_unit_z	GwySIUnit	Единица измерения размеров по глубине.
si_unit_w	GwySIUnit	Единица измерения значений данных.
data	массив вещественных чисел двойной точности	Данные поля, сохранённые как плоский массив размера xres×yres×zres, с нулевой до последней плоскости, сверху вниз и слева направо.
calibration	GwyDataLine	Калибровка оси z, представляющая нелинейные отсчёты шкалы в этом направлении. Число точек должно быть равно zres. Этот компонент присутствует только если используется нелинейная дискретизация вдоль этой оси.

Данные XYZ

Следующая таблица сводит воедино общие ключи для данных XYZ в контейнере верхнего уровня для таких данных с номером 0. Для других данных XYZ, число 0 должно быть заменено соответствующим номером блока такого типа данных. Следует отметить, что данные XYZ обычно нумеруются последовательно, начиная с 0, однако, они могут иметь любые номера и множество номеров блоков данных не обязательно должно быть непрерывным.

Ключ	Тип	Значение
/xyz/0	GwySurface	Данные XYZ.
/xyz/0/preview	GwyDataField	Растеризованное изображение предпросомтра которое показывается при отображении данных XYZ в окне. Следует отметить, что хотя изображения предпросмотра сохраняются в файлах GWY, они обычно являются создаётся заново и обновляется при показе данных так что добавлять их при записи файла GWY редко будет полезным занятием.
/xyz/0/title	строка	Имя данных XYZ, как оно показывается в окне браузера данных.
/xyz/0/visible	булев	Следует ли отображать данные XYZ в окне при загрузке файлов.
/xyz/0/preview/palette	строка	Имя градиента псевдоцвета используемого при отображении изображения предпросмотра.

Ключ	Тип	Значение
/xyz/0/meta	GwyContainer	Метаданные данных XYZ. Ключи это имена, которые будут отображаться в окне просмотра метаданных, строковые значения – значения данных.
/xyz/0/log	GwyStringList	Журнал работы с объёмными данными. Он имеет формат тип::function(param=value, ...)@time.

Данные XYZ представлены как объекты GwySurface. Компоненты GwySurface представлены в следующей таблице:

Компонент	Тип	Значение
si_unit_xy	GwySIUnit	Единица измерения горизонтальных размеров.
si_unit_z	GwySIUnit	Единица измерения значений данных.
data	массив вещественных чисел двойной точности	Данные XYZ, сохранённые как плоский массив с длиной кратной 3. Каждый триплет XYZ сохраняется вместе, что приводит к следующему порядку следования данных: x_0, y_0, z_0, x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, и т.д.

Данные карты кривых

Следующая таблица обобщает общие ключи для данных, относящихся к карте кривых в контейнере верхнего уровня для элемента данных номер 0. Для других карт кривых, номер 0 нужно заменить на соответствующий номер карты кривых. Следует отметить, что карты кривых обычно нумеруются последовательно, начиная с 0, однако, они могут иметь любые индексы и множество номеров карт кривых не обязательно должно быть непрерывным.

Ключ	Тип	Значение
/lawn/0	GwyLawn	Данные карты кривых.
/lawn/0/preview	GwyDataField	Изображение предпросмотра, которое отображается когда данные карты кривых показываются в окне.
/lawn/0/title	строка	Имя данных XYZ, как оно показывается в окне браузера данных.
/lawn/0/visible	булев	Следует ли отображать данные XYZ в окне при загрузке файлов.
/lawn/0/preview/palette	строка	Имя градиента псевдоцвета используемого при отображении изображения предпросмотра.
/lawn/0/preview/realsquare	булев	Должно ли изображение показываться в окне в режиме Равные масштабы осей (или, наоборот, в режиме Квадратные пиксели).
/lawn/0/meta	GwyContainer	Метаданные карты кривых. Ключи это имена, которые будут отображаться в окне просмотра метаданных, строковые значения – значения данных.
/lawn/0/log	GwyStringList	Журнал работы с объёмными данными. Он имеет формат тип::function(param=value, ...)@time.

Данные карты кривых представлены как объекты GwyLawn. Компоненты type>GwyLawn

Компонент	Тип	Значение
xres	32битное целое	Горизонтальный размер в пикселях.

Компонент	Тип	Значение
yres	32битное целое	Вертикальный размер в пикселях.
ncurves	32битное целое	Количество кривых в каждом пикселе.
curvelengths	массив 32битных целых	Массив размером xres × yres содержащий количество отсчётов в каждом пикселе (в обычном для изображений порядке). Количество отсчётов может быть нулевым.
xreal	вещественное двойной точности	Горизонтальный размер в физических единицах.
yreal	вещественное двойной точности	Вертикальный размер в физических единицах.
xoff	вещественное двойной точности	Горизонтальное смещение верхнего левого угла в физических единицах. Обычно записывается только если не равно нулю.
yoff	вещественное двойной точности	Вертикальное смещение верхнего левого угла в физических единицах. Обычно записывается только если не равно нулю.
si_unit_xy	GwySIUnit	Единица измерения горизонтальных размеров.
si_units_curves	массив объектов GwySIUnit	Единицы измерения данных кривых, как массив с ncurves элементов.
data	массив вещественных чисел двойной точности	Объединенные данные кривых, сохраненные как плоский массив, размер которого кратен числу кривых (ncurves). Данные сохраняются в обычном для изображений порядке. Сначала объединяются и сохраняются все кривые в верхнем левом пикселе, затем все в следующем пикселе справа и т.д. Чтение и запись этого элемента требует использовать curvelengths для правильной индексации.
curve_labels	массив строк	Опциональный массив с числом элементов ncurves задающий метки кривых.
nsegments	32битное целое	Число сегментов, на которые будет разбита каждая из кривых – если кривые делятся на сегменты. В этом случае элемент segments должен задавать сегментацию.
segments	массив 32битных целых	Сегментация каждой кривой, задаваемая как стартовый и конечный индекс для каждого сегмента в каждой кривой. Размер массива xres × yres × 2nsegments. Сегменты не должны точно делить кривую, они могут пересекаться и между ними могут быть неиспользуемые части кривой.
segment_labels	массив строк	Опциональный массив с числом элементов nsegments задающий метки сегментов.

Другие элементы

Основной GwyContainer также содержит элементы, которые не относятся ни к одному из отдельных каналов, графиков или данных других типов.

Ключ	Тип	Значение
/filename	строка	Имя файла, с которым GwyContainer в данный момент связан. Если он был сохранён в файл, то этот элемент содержит соответствующее имя файла. В противном случае данный элемент содержит имя файла, из которого данные были загружены или импортированы. Элемент может быть не задан, например, в случае только что созданных синтетических данных.

Вспомогательные объекты

Компоненты GwySIUnit представлены в следующей таблице:

Компонент	Тип	Значение
unitstr	строка	Текстовое представление единицы измерения, например, "A" или "m^-1" (как базовые единицы СИ, префиксы игнорируются).

Компоненты GwySelection сведены в следующую таблицу. Некоторые типы выделенного могут содержать другие элементы данных; обратитесь к документации к конкретному типу выделенного о том, как интерпретировать данные.

Компонент	Тип	Значение
max	32битное целое	Максимальное число объектов. которое может быть в выделенном (число, установленное gwy_selection_set_max_objects()).
data	массив вещественных чисел двойной точности	Данные выделения. Число элементов, которые формируют один объект выделения определяется типом выбранного.

Компоненты типа GwyStringList сведены в следующую таблицу. Если GwyStringList используется для представления журнала, строки будут иметь определённую структуру, описанную выше.

Компонент	Тип	Значение
strings	массив строк	Список строковых элементов.

5.13 Файлы с простым полем (GSF)

Встроенный формат файлов Gwyddion сохраняет всю информацию и состояние, которые нужно хранить программе, и, следовательно, устроен достаточно сложно. Часто не является разумным сохранять файлы в формате .gwy в других программах и скриптах, создающих входные файлы для программы Gwyddion.

Вместо этого можно использовать формат файла с простым полем Gwyddion (.gsf) для этих целей. Это формат с одним каналом для двумерных данных, который разработан чтобы его можно было просто и эффективно читать и писать, с человекочитаемым заголовком, достаточно выразительный и избегающий специфичных для прибора или приложения полей (хотя опционально формат может их содержать).

GSF может быть прочитан и записан Gwyddion версии 2.20 и выше.

Общая структура

Файл GSF состоит из четырёх частей в следующем порядке:

магическая строка Файлы начинаются с «магической строки», определяющей тип файла.

текстовый заголовок Заголовок состоит из строк в формате

```
<i>имя</i> = <i>значение</i>
```

определяющих отдельные параметры.

выравнивание с помощью NUL Заголовок заканчивается от одного до четырёх байтов NUL, выравнивая начало блока данных кратно 4.

двоичные данные Двоичные данные хранятся в 32-битном формате с плавающей точкой.

Магическая строка

Файлы GSF начинаются со строки

```
Gwyddion Simple Field 1.0
```

завершенной символом перевода строки (\n, ASCII 0x0a).

Текстовый заголовок

Каждая строка заголовка имеет формат

```
<i>имя</i> = <i>значение</i>
```

где любой пробельный символ перед именем, вокруг знака равенства и в конце значения игнорируется. Имена полей чувствительны к регистру и следуют обычным правилам для идентификаторов в языках программирования.

Подобно магической строке, строки в текстовом заголовке заканчиваются символом перевода строки, как принято в Unix. Это означает, что заголовок должен читаться и писаться в двоичном режиме для сохранения символов перевода строки на других системах (и неизменности размера заголовка, например при преобразовании LF → CRLF).

Любые символы не из алфавита ASCII, которые могут попасться, например, в имени канала, представлены в кодировке UTF-8. Символ NUL не может встречаться в заголовке.

Поля заголовка:

Имя	Тип	Значение
XRes	Обязательно	Горизонтальный размер в пикселях, положительное целое.
YRes	Обязательно	Вертикальный размер в пикселях, положительное целое.
XReal	Опционально	Горизонтальный размер в физических единицах (заданных XYUnits), положительное число с плавающей точкой. По умолчанию равно 1.0 если не задано.
YReal	Опционально	Вертикальный размер в физических единицах (заданных XYUnits), положительное число с плавающей точкой. По умолчанию равно 1.0 если не задано.
XOffset	Опционально	Горизонтальное смещение в физических единицах (заданных XYUnits), положительное число с плавающей точкой. По умолчанию равно 0.0 если не задано.
YOffset	Опционально	Вертикальное смещение в физических единицах (заданных XYUnits), положительное число с плавающей точкой. По умолчанию равно 0.0 если не задано.
Title	Опционально	Заголовок данных/канала. Не имеет значения по умолчанию, приложения могут отображать 'Unknown' или нечто подобное если не задан.
XYUnits	Опционально	Пространственные единицы, т.е. единицы физических размеров и смещений. Они должны быть заданы как базовые единицы, которыми являются m или A без префикса, обозначающего степень 10 (Gwyddion с этим справится, но это может создавать проблемы другим программам). По умолчанию величины безразмерные. Это означает, что для данных СЗМ вы обычно захотите задать XYUnits как m поскольку пространственные размеры измеряются в метрах.
ZUnits	Опционально	Единицы значения, т.е. единицы значений данных. См. XYUnits выше для дополнительной информации.

Числа с плавающей точкой могут быть в научном формате, т.е. 1.23e-4. Они представлены в стандартной локали C/POSIX, десятичным разделителем является точка (не запятая и не другие разделители).

Заголовок может содержать другие поля помимо описанных выше. Gwyddion загрузит их в метаданные. Общие информационные поля могут включать Комментарий, Дату или Направление.

Поля могут идти в любом порядке, тем не менее, рекомендуется начинать с обязательных полей, затем привести опциональные и закончить нестандартными.

Пример простого заголовка (также включает магическую строку):

```
Gwyddion Simple Field 1.0 XRes = 400 YRes = 400 XReal = 5e-05 YReal = 5e-05 XYUnits = m ↩
    ZUnits = V Title = ADC2
```

выравнивание с помощью NUL

За текстовым заголовком идёт от одного до четырёх байтов NUL (\0, ASCII 0x00), которые (a) завершают его и (b) выравнивают начало двоичных данных от начала файла на величину, кратную 4. Точнее, обозначив N общую длину магической строки и текстового заголовка, данные начинаются в ближайшем числе, кратном 4 и большем, чем N.

Это кратное 4 выравнивание гарантирует выровненный доступ к памяти при отображении файла непосредственно в память. Количество байтов NUL однозначно определяется остатком от деления длины на 4 ($N \bmod 4$):

Остаток	Число выравнивающих символов NUL
0	4
1	3
2	2
3	1

Двоичные данные

Значения данных хранятся как 32-битные числа с плавающей точкой IEEE одинарной точности, в формате следования байтов начиная с младшего (LSB, or Intel). Данные сохраняются по строкам, сверху вниз и в каждой строке слева направо.

Подобно файлам GWY, данные не должны содержать бесконечных значений и значений NaN (не число). Gwyddion заменяет и показывает в виде маски такие данные при импорте начиная с версии 2.57, но поведение в более ранних версиях не определено.

Физические величины этих значений - ZUnits.

Размер данных изображения точно 4*XRes*YRes и после них в файле больше не должно быть данных.

5.14 Простые файлы XYZ

Хотя Gwyddion не работает с произвольными данными в формате XYZ и необработанные данные XYZ при импорте интерполируются на регулярную сетку, возникла необходимость создать файловый формат, подобный по духу формату простого поля Gwyddion (.gsf), но представляющий данные в формате XYZ. Такой файловый формат, названный Gwyddion XYZ Field (.gxyzf), описывается в данном разделе.

Следует отметить, что Z просто оболзначает в данном случае ординату. Значения Z в файле могут быть в действительности реальными координатами по Z (высотами), но также могут быть токами, напряжениеями и т.п.

Файлы GXYZF могут быть записаны Gwyddion версии 2.31 или более поздней. Они также могут читаться начиная с этой версии, хотя выравнивание по сетке может быть достаточно грубым.

Общая структура

Файл GXYZF состоит из четырёх частей в следующем порядке:

магическая строка Файлы начинаются с «магической строки», определяющей тип файла.

текстовый заголовок Заголовок состоит из строк в формате

```
<i>имя</i> = <i>значение</i>
```

, определяющих отдельные параметры.

выравнивание с помощью NUL Заголовок заканчивается NUL-байтами от одного до восьми, выравнивающими начало данных на смещение, кратное 8.

двоичные данные Двоичные данные записываются в 64битном формате с плавающей точкой.

Магическая строка

Файлы gxyzf начинаются со строки

```
Gwyddion XYZ Field 1.0
```

которая заканчивается символом перевода строки (\n, ASCII 0x0a).

Текстовый заголовок

Каждая строка заголовка имеет формат

```
<i>имя</i> = <i>значение</i>
```

, где любой пробельный символ перед именем, вокруг знака равенства и в конце значения игнорируется. Имена полей чувствительны к регистру и следуют обычным правилам для идентификаторов в языках программирования.

Подобно магической строке, строки в текстовом заголовке заканчиваются символом перевода строки, как принято в Unix. Это означает, что заголовок должен читаться и писаться в двоичном режиме для сохранения символов перевода строки на других системах (и неизменности размера заголовка, например при преобразовании LF → CRLF).

Любые символы, не входящие в ASCII, которые могут встречаться, например, в названиях каналов, представлены в кодировке UTF-8. Символ NUL не может встречаться в заголовке.

Поля заголовка:

Название	Тип	Значение
NChannels	Обязательно	Число каналов значений (Z), положительное целое. Данные, сохраняемые для каждой точки также включают в себя координаты X и Y, но они не учитываются в NChannels.
NPoints	Обязательно	Число точек данных в файле.
XYUnits	Опционально	Пространственные единицы измерения, т.е. единицы для значений X и Y. Должны быть заданы как основные единицы измерения, такие как m или A без десятичных префиксов (Gwyddion может разрешить эту ситуацию, но это может вызывать проблемы с другим программным обеспечением). По умолчанию единиц измерения нет. Это означает, что для данных СЗМ вы наверное захотите задать XYUnits как m поскольку латеральные размеры измеряются в метрах.
ZUnits1, ZUnits2, ...	Опционально	Единицы измерения значений, т.е. единицы значений данных для индивидуальных каналов. Каналы нумеруются от 1 до NChannels. См. XYUnits выше для дополнительной информации.
Title1, Title2, ...	Опционально	Названия отдельных каналов. Каналы нумеруются от 1 до NChannels. У названий нет значения по умолчанию, пприлoжения могут показывать 'Unknown' или что-то подобное если название не задано.
XRes	Опционально	Подсказка, указывающая предпочитаемый горизонтальный размер в пикселях если данные интерполируются на сетку, положительное целое. Программы чтения данных могут не учитывать её и интерполировать данные на сетку иного разрешения.

Название	Тип	Значение
YRes	Опционально	Подсказка, указывающая предпочитаемый горизонтальный размер в пикселях, если данные интерполируются на сетку, положительное целое. Программы чтения данных могут не учитывать её и интерполировать данные на сетку с другим разрешением.

Заголовок может содержать другие поля помимо описанных выше. Gwyddion загрузит их в метаданные. Общие информационные поля могут включать Комментарий, Дату или Направление.

Поля могут идти в любом порядке, тем не менее, рекомендуется начинать с обязательных полей, затем привести опциональные и закончить нестандартными.

Простой образец заголовка файла с двумя каналами (также включает в себя магисческую строку):

```
Gwyddion XYZ Field 1.0 NChannels = 2 NPoints = 457884 XYUnits = m ZUnits1 = m ZUnits2 = V ↩
    Title1 = Height Title2 = ADC2
```

выравнивание с помощью NUL

Текстовый заголовок заканчивается NUL-байтами (\0, ASCII 0x00) в количестве от одного до восьми, которые (a) завершают его и (b) выравнивают смещение начала данных в файле на величину, кратную 8. Точнее, обозначив N общую длину магической строки и текстового заголовка, данные начинаются с ближайшего числа, кратного 8, которое больше чем N.

Дополнение до кратного 8 обеспечивает выравнивание данных при доступе к памяти при прямом отображении файла в память. Число нулевых байтов однозначно определяется остатком после деления длины заголовка на 8 (N mod 8):

Остаток	Число выравнивающих символов NUL
0	8
1	7
2	6
3	5
4	4
5	3
6	2
7	1

Двоичные данные

Значения данных хранятся как 64битные числа с плавающей точкой двойной точности стандарта IEEE, порядок байтов от младшего к старшему (little-endian, LSB или Intel). Точки хранятся в произвольном порядке. Каждая точка хранится как блок NChannels+2 значений: X, Y и затем все значения ординат в порядке следования каналов.

Физические единицы измерения значений задаются XYUnits для X и Y и затем ZUnits1, ZUnits2, ... для значений ординат.

Размер данных ровно 8*NPoints*(NChannels+2) байт и после них в файле не должно быть данных.

Глава 6

Сборка из исходного кода и разработка

6.1 Зависимости при сборке

В следующей таблице перечислены пакеты, которые нужны для сборки Gwyddion из исходного кода. Если в вашей операционной системе пакеты разработки для библиотек поставляются отдельно, их также нужно установить. Таблица не включает в себя обязательные вещи, необходимые для сборки, такие как компилятор C или программу make. Зависящие от операционной системы вещи описаны в следующих разделах, посвящённых сборке в определённых операционных системах.

Минимальные требуемые версии указаны для некоторых пакетов. Если особой версии не указано, подразумевается, что минимально требуемая версия настолько стара, что её не нужно точно указывать. Особые версии окружения могут быть указаны в столбце зависимостей, что означает что этот пакет будет полезен только в определенном окружении.

Пакет	Версия	Необходимость	Для чего нужно и замечания
pkg-config	0.16	Требуется	Отслеживание местоположений, флагов компилятора и редактора связей для различных пакетов.
GTK+ 2	2.18.0	Требуется	Интерфейс пользователя Gwyddion. Этот элемент также подразумевает все зависимости самой GTK+, такие как: GLib, Gdk-Pixbuf, Pango и Cairo.
GLib	2.32.0	Требуется	Всё. Glib нужна для работы GTK+, но Gwyddion требует чуть более новую версию, чем строго требуется для GTK+.
Pango	1.10	Требуется	Вся отрисовка текста. Этот элемент подразумевает pangocairo, который является опциональным компонентом Pango и в принципе может быть отключен. Однако, обычно его включают в пакеты Pango.
Cairo	1.2	Требуется	Всё рисование в GTK+. Рекомендуется использовать версию по крайней мере 1.6.
FFTW3	3.1	Требуется	Интегральные преобразования, спектр мощности, свёртка, деконволюция и операции корреляции. Если OpenMP включен и обнаружена поддержка FFTW3 с поддержкой OpenMP, Gwyddion может использовать многопоточное быстрое преобразование Фурье.
GtkGLExt	1.0	Опционально	Окна трёхмерного просмотра на основе OpenGL. Также подразумеваются зависимости самой GtkGLExt, такие как системные библиотеки и заголовочные файлы OpenGL.

Пакет	Версия	Необходимость	Для чего нужно и замечания
libunique	1.0	Опционально	Дистанционное управление, основанное на D-BUS или то технологии, которая включена в настоящее время.
Python	2.4	Опционально	Pygwy, интерфейс написания Python-скриптов в Gwyddion. Для сборки pygwy нужен не только интерпретатор Python, но также его заголовочные файлы и библиотеки разработчика.
PyGTK2	2.10	Опционально	Pygwy, скриптовый интерфейс к Gwyddion на основе Python. Чтобы собрать pygwy потребуются части PyGTK2, участвующие в процессе компиляции, т.е. codegen.
GtkSourceView 2		Опционально	Подсветка синтаксиса в командной строке оболочки Python.
OpenMP	3.1	Опционально	Ускорение различных расчётов с использованием распараллеливания с помощью OpenMP. OpenMP не является отдельным программным обеспечением, но дополнительный пакет может понадобиться чтобы включить его поддержку в вашем компиляторе языка C.
zlib		Опционально	Импорт файлов данных в формате SPML и импорт данных, сжатых gzip, в некоторых других форматах (Createc, NRRD, метаданные RHK SM4 PRM).
libzip	0.11	Опционально	Импорт файлов данных APE DAX, NanoObserver, NanoScanTech, OpenGPS, ATC SPMxFormat, Sensofar PLUX, ZON, numpy NPZ, Matlab 5 MAT и данных силовых кривых JPK, которые используют сжатие ZIP. В качестве альтернативы можно использовать minizip. Требуется только одна из библиотек для работы с ZIP.
minizip		Опционально	Импорт файлов данных APE DAX, NanoObserver, NanoScanTech, OpenGPS, ATC SPMxFormat, Sensofar PLUX, ZON, numpy NPZ, Matlab 5 MAT и данных силовых кривых JPK, которые используют сжатие ZIP. Версии minizip меняются часто; версии 1, 2 и 3 должны работать. Это альтернативный вариант вместо libzip. Требуется только одна из библиотек для работы с ZIP.

Пакет	Версия	Необходимость	Для чего нужно и замечания
zziplib		Опционально	Импорт файлов данных APE DAX, NanoObserver, NanoScanTech, OpenGPS, ATC SPMxFormat, Sensofar PLUX, ZON, numpy NPZ, Matlab 5 MAT и данных силовых кривых JPK, которые используют сжатие ZIP. Это резервный альтернативный вариант вместо libzip и minizip, которые являются предпочтительными. Требуется только одна из библиотек для работы с ZIP.
bzip2		Опционально	Импорт данных, сжатых bzip2, из NRRD.
LibXML2		Опционально	Импорт файлов данных SPML, APE DAX и Anasys XML.
HDF5	1.8.13	Опционально	Импорт файлов Asylum Research Ergo, Shilps Lucent, Matlab 7 MAT и простых файлов данных в формате HDF5.
JANSSON		Опционально	Импорт файлов данных Park PSPPT.
libpng		Опционально	Эспорт полей высот в 16битные изображения PNG в градациях серого и импорт 16битных изображений PNG. Для обычных 8битных изображений нужна только поддержка PNG в GdkPixbuf.
libwebp		Опционально	Поддержка формата WebP при экспорте изображений.
jpegxl		Опционально	Поддержка формата JPEG-XL при экспорте изображений.
Загрузчик pixbuf формата WebP		Опционально	Поддержка формата WebP для импорта изображений. Это зависимость времени исполнения. Не имеет значения, был ли доступен загрузчик pixbuf во время компилляции Gwyddion.
загрузчик pixbuf формата HEIF		Опционально	Поддержка High Efficiency Image File Format при импорте изображений. Это зависимость времени исполнения. Вне зависимости от того, был ли доступен этот загрузчик при компиляции Gwyddion, он будет работать при наличии его в системе.
Загрузчик pixbuf формата JPEG-XL		Опционально	Поддержка формата JPEG-XL для импорта изображений. Это зависимость времени исполнения. Не имеет значения, был ли доступен загрузчик pixbuf во время компилляции Gwyddion.
OpenEXR		Опционально	Импорт и экспорт изображений OpenEXR HDR.

Пакет	Версия	Необходимость	Для чего нужно и замечания
компилятор C++		Опционально	Импорт и экспорт изображений OpenEXR HDR и импорт других изображений с большой глубиной цвета.
cfitsio		Опционально	Импорт файлов Flexible Image Transport System (FITS).
desktop-file-utils		Опционально, Unix	Основная интеграция в окружение рабочего стола на соответствующих стандартам Freedesktop окружениях, такая как установка Gwyddion в меню и ассоциации типов файлов.
gtk-mac-integration		Опционально, OS X	Интеграция в среду OS X, например, использование глобального меню.
libXmu		Устарело, X11	Дистанционное управление на системах X11. Это стандартная библиотека X Window System и при наличии в системе X, эта библиотека скорее всего также имеется. Тем не менее, после разделения X на модули начиная с Xorg 7.0 она распространяется отдельно, и файлы для разработки с её помощью могут быть не установлены.

6.2 Сборка в среде Linux/Unix

Система сборки Gwyddion на Unix основана на GNU autotools (autoconf, automake, libtool), так же, как и большинство современного свободного программного обеспечения и программ с открытым исходным кодом под Unix. Если вы когда-либо собирали программы из исходников, вы, вероятно, уже встречались с autotools и знаете, что делать дальше. Этот раздел, тем не менее, будет описывать процесс сборки достаточно детально, чтобы быть понятным и тем, кто ещё этого не делал. ФайлINSTALL в каталоге верхнего уровня архива с исходным кодом содержит общие инструкции по установке с помощью GNU autotools.

Краткие инструкции

Если вам уже знакома последовательность действий:

```
tar -jxvf gwyddion-2.49.tar.xz
cd gwyddion-2.49
./configure
make
make install
```

Распаковка исходного кода

Распакуйте архив с исходным кодом командой

```
tar -Jxvf gwyddion-2.49.tar.xz
```

заменяя 2.49 текущим номером версии. При этом будет создан каталог gwyddion-2.49 (снова с текущим номером версии вместо 2.49), перейдите с помощью cd в этот каталог. Все остальные действия по сборке будут проходить там.

Если в операционной системе отсутствует xz, можно загрузить gwyddion-2.49.tar.gz (сжатый с помощью gzip) вместо предыдущего архива и распаковать его с помощью

```
tar -zxvf gwyddion-2.49.tar.gz
```

Однако, современные Unix и подобные им системы поддерживают и gzip, и xz, и заметно меньший gwyddion-2.49.tar.xz обычно будет более удачным вариантом.

Настройка

Запустите

```
./configure
```

чтобы сконфигурировать сборку Gwyddion.

Скрипт оболочки configure пытается угадать правильные значения для различных переменных, меняющихся от системы к системе и используемых в процессе компиляции. Он использует эти переменные чтобы создать Makefile в каждом каталоге пакета, набор заголовочных файлов с расширением .h, которые содержат зависящие от системы определения и некоторые другие вспомогательные файлы. В конце своей работы он создаёт другой скрипт оболочки config.status, который можно затем использовать для повторения текущей конфигурации, и файл config.log, который содержит подробности процесса детектирования и который полезно включать в сообщения об ошибках компиляции. В конце команда configure также выводит суммарную сводку о включенных и выключенных дополнительных опциях, включая причины почему опция была выключена.

Если configure пишет об отсутствии требуемых пакетов, установите эти пакеты и перезапустите её. То же самое справедливо и для случая, если configure заканчивается успешно, но вы обнаружили, что забыли установить опциональный компонент, с которым хотели собрать Gwyddion. Возможно, что пакет не был найден или был неправильно определён даже если вы его установили, а именно если он был установлен в нестандартный каталог. В этом случае необходимо настроить определённые переменные окружения чтобы дать configure возможность найти эти пакеты:

PKG_CONFIG_PATH Большинство пакетов идут вместе с так называемыми файлами pkg-config (.pc), которые описывают как программы должны собираться и линковаться с ними. configure использует информацию из этих файлов, следовательно, PKG_CONFIG_PATH должна быть установлена таким образом, чтобы там были перечислены все нестандартные кактaлоги с нужными файлами pkg-config. Чтобы добавить, например, установленную библиотеку GTK+ в /opt/gnome и установленную библиотеку FFTW3 в $HOME/opt/fftw3, нужно выполнить:

```
PKG_CONFIG_PATH=/opt/gnome/lib/pkgconfig:$HOME/opt/fftw3/lib/pkgconfig
export PKG_CONFIG_PATH
```

PATH, LD_LIBRARY_PATH, DYLD_LIBRARY_PATH Может потребоваться настроить эти переменные чтобы включить нестандартные каталоги с исполняемыми файлами и библиотеками соответствующих пакетов. Переменные LD_LIBRARY_PATH и DYLD_LIBRARY_PATH обе задают путь поиска для разделяемых библиотек, но первая используется в системах на основе Linux и BSD, в то время, как вторая на OS X.

CPPFLAGS, LDFLAGS Может потребоваться настроить эти переменные чтобы включить нестандартные каталоги с заголовочными файлами и библиотеками пакетов, с которыми не шло файлов pkg-config, например, для libTIFF в /usr/local можно установить:

```
CPPFLAGS=-I/usr/local/include
export CPPFLAGS
LDFLAGS=-L/usr/local/lib
export LDFLAGS
```

Опция --prefix команды configure задаёт базовый каталог установки. Компоненты программы будут установлены в его подкаталоги bin, lib, share, и т.д. (которые будут созданы если они не существуют). Более детальное управление возможно с помощью опций, задающих отдельные подкаталоги, таких как --bindir, --libdir. Префикс по умолчанию – /usr/local/bin, чтобы установить Gwyddion в домашний каталог пользователя можно использовать, например команду

```
./configure --prefix=$HOME/opt/gwyddion
```

Если вы устанавливаете Gwyddion для личного использования это является рекомендованным вариантом, поскольку в этом случае не требуется выполнять действий с правами суперпользователя.

Настройки процесса конфигурирования

Необязательные возможности можно включить/выключить с помощью опций вроде --with-foo/--without-foo или --enable-foo/--disable-foo. Например, компиляция с zlib может быть отключена командой:

```
./configure --without-zlib
```

По умолчанию все опциональные возможности включены, если найдены все требуемые для их реализации библиотеки. Краткая информация о включенных и отключенных опциональных возможностях печатается в выводе команды configure недалеко от его конца.

Полный список опций и важных переменных configure можно получить с помощью команды:

```
./configure --help
```

Список будет длинным и большая часть опций контроллирует включение/выключение отдельных опциональных возможностей или передачу необходимых флагов компиляции и связывания для различных библиотек. Например, задавая FFTW3_CFLAGS и FFTW3_LIBSможно задать (или переопределить) как будет осуществляться компиляция и связывание с FFTW3. Однако, такое ручное задание является резервным вариантом для гораздо более удобного метода, основанного на использовании pkg-config в том случае если он почему-то не работает.

Некоторые интересные общие опции описаны в следующих параграфах.

Настройки пользователей

С Gwyddion поставляются различные файлы взаимодействия со средой рабочего стола, которые определяют типы MIME, элементы меню, привязки файлов, генерацию миниатюр и т.п. Если Gwyddion устанавливается в системный каталог, они обычно находятся в правильных местах файловой системы. Однако, если вы устанавливаете его куда-то в свой каталог пользователя, то эти файлы нужно поместить в другое место. а именно в определённые скрытые каталоги, начинающиеся с точки в вашем домашнем каталоге.

Это можно задать с помощью опции --enable-home-installation команды configure. Следует отметить, что использование этой опции приводит к установке файлов в каталоги вне заданного префикса.

Настройки создателей пакетов

Если Gwyddion устанавливается во временный каталог для дальнейшего создания пакета, необходимо отключить определённые действия после установки, которые нужно производить с системой, где пакет будет установлен, а не в момент создания пакета.

Обновление файлов FreeDesktop может быть отключено с помощью --disable-desktop-file-update. Установка схем GConf2 может быть отключена с помощью --disable-schemas-install. Обычно это не надо делать в явной форме т.к. установки в временный каталог используют непустую переменную DESTDIR (см. раздел установка). Если переменная DESTDIR не пустая, система сборки пропустит автоматически действия после установки. Тем не менее, обычной причиной отключения этих действий является то. что Gwyddion устанавливается на временное место вместо финального каталога (что обычно происходит при сборке пакетов в Linux). В этом случае вспомогательные действия отключаются автоматически при непустой переменной DESTDIR (см. раздел установка) и, следовательно, нет нужды отключать их в configure.

Передавая параметр --enable-library-bloat скрипту configure заставляет связываться модулям со всеми библиотеками. Это автоматически включается на MS Windows, где это является обязательным требованием. В основанных на Unix системах, связывание модулей со всеми библиотеками, которые уже загружены основной программой только напрасно замедляет работу (как во время сборки, так и во время исполнения). Таким образом, модули не связываются непосредственно с основными библиотеками вроде GLib. если ваша система или правила сборки требуют связывания модулей со всеми библиотеками (например, в системах, основанных на AltLinux), использование этой опции включает данное поведение.

Передачей опции --disable-module-bundling команде configure можно запретить объединение всех модулей одного типа (файловых, обработки данных, ...) в одну разделяемую библиотеку, что обычно делается для сохранения места на диске и ускорения загрузки. Хотя подобное объединение не меняет функциональность, оно заметно меняет набор устанавливаемых файлов. Если вы, по той или иной причине, полагаетесь на наличие на диске файла gwyfile.so, самое время остановиться и перестать так делать. Тем не менее, можно использовать данную опцию чтобы принудительно получить традиционный вариант установки, где каждый модуль находился в отдельном файле.

Настройки для разработчиков

Если вы собираетесь накладывать патч или иным образом модифицировать исходный код Gwyddion запустите configure с опцией --enable-maintainer-mode чтобы включить различные правила обновления и пересборки, которые не используются при обычной компиляции. В зависимости от вида изменений могут понадобиться некоторые дополнительные инструменты, описанные в разделе Снимок Subversion, разработка.

По умолчанию справочное руководство по C API не пересобирается. Подготовленные файлы HTML распространяются с архивом, документация меняется редко и её генерация требует достаточно продолжительного времени. Для того, чтобы включить генерацию документации по API нужно передать опцию --enable-gtk-doc скрипту configure. Естественно, вам потребуется gtk-doc. Следует отметить, что configure предупредит вас, если вы включили режим мантейнера, но выключили gtk-doc (что может быть полезно для того, чтобы не пересобирать постоянно и бесцельно документацию). Если вы не собираетесь делать make dist, это предупреждение безвредно.

Компиляция

Запустите

```
make
```

и подождите, пока Gwyddion соберётся. Если команда configure завершилась без ошибок, компиляция тоже должна пройти успешно. Для того, чтобы уменьшить время ожидания, можно разрешить параллельную компиляцию запуская make командой

```
make -j6
```

где 6 необходимо заменить реальным количеством доступных процессорных ядер.

Если вам понадобилось сделать нечто необычное, чтобы собрать пакет, постарайтесь выяснить, как configure может обнаружить, когда и что нужно делать, и пришлите патчи или инструкции на адрес электронной почты для сообщений об ошибках, чтобы можно было включить их в следующий релиз.

Установка

Gwyddion нужно установить перед запуском, его нельзя запустить неустановленным.

Выполните

```
make install
```

для установки Gwyddion в целевой каталог. Если вы устанавливаете Gwyddion в системный каталог, вам необходимо стать суперпользователем чтобы выполнить эту команду. Это единственная команда. которую обязательно нужно запускать от суперпользователя при установке. Например, используя sudo

```
sudo make install
```

Чтобы установить Gwyddion во временное место, например, для сборки пакета, установите переменную make DESTDIR на префикс, который будет добавлен ко всем целевым каталогам:

```
make install DESTDIR=/var/tmp/gwyddion-buildroot
```

Не переопределяйте переменные отдельных каталогов такие, как bindir, libdir.

Если вы не устанавливаете в системный каталог, т.е. устанавливаете в подкаталог домашнего каталога, может потребоваться настройка следующих переменных окружения в процессе установки:

- GCONF_SCHEMA_CONFIG_SOURCE – местоположение схем GConf2
- KDE4_MODULE_DIR – местоположение модулей KDE4

Также может потребоваться настройка переменной XDG_DATA_DIRS для полной интеграции с окружением рабочего стола.

Если вы установили Gwyddion в /usr/local и получили сообщение об ошибке libgwyapp.so.0 не может быть найдена, в вашей системе, по видимому, отсутствуют стандартные каталоги для библиотек в настройках динамического линкера. Такое было замечено на Ubuntu. Отредактируйте файл /etc/ld.so.conf и добавьте туда строку

```
/usr/local/lib
```

Запуск

Запуск Gwyddion обычно не требует дополнительных настроек.

Но некорректная реализация особенностей некоторых сред рабочего стола, может привести Gwyddion в нерабочее состояние и эту функциональность нужно отключить. Перехват главного меню программы в Unity делает большую часть меню Gwyddion недоступными. Это можно отключить сбросив переменную окружения UBUNTU_MENUPROXY при запуске Gwyddion:

```
UBUNTU_MENUPROXY= gwyddion
```

Отмена установки

Запустите

```
make uninstall
```

в каталоге, где ранее собирался Gwyddion для его удаления. Если вы уже утратили содержимое этого каталога, можно попробовать распаковать, настроить и собрать его точно так же, как ранее и после этого выполнить make uninstall, хотя результат зависит от вашей способности точно повторить процесс сборки.

Пакеты RPM

В основанных на RPM дистрибутивах GNU/Linux можно собрать RPM-пакеты напрямую из архивов с исходным кодом выполнив команду

```
rpmbuild -tb gwyddion-2.49.tar.xz
```

где 2.49 – текущая версия, как упоминалось ранее. Этот метод тестировался в основном на Fedora, openSuSE и Mandriva и spec-файл RPM содержит некоторые специальные директивы для этих систем. Особая поддержка других основанных на RPM систем может быть добавлена по запросу.

6.3 Mac OS X

Большая часть вышеупомянутых общих инструкций по установке на Unix/Linux также применима для OS X. Следовательно, этот раздел посвящён в основном особенностям установки на OS X, часть шагов, приведённых здесь подробнее описана в разделе про Unix.

Помимо сборки всего вручную (удачи), в настоящее время есть два варианта, как установить Gwyddion:

- используя MacPorts (ранее известный, как Darwinports) и собирая из Portfile.
- используя Fink и устанавливая Gwyddion используя apt-get.
- используя Homebrew и собирая Gwyddion используя формулу приготовления (brew formula).

Подготовка

Чтобы установить и запустить Gwyddion вам нужны установленные Xcode Tools и X (SDK и App). Они находятся на системных CD/DVD-дисках. Xcode Tools находились на первом DVD как XcodeTools.mpkg в подкаталоге Xcode Tools, X11SDK находится под именем X11SDK.pkg в подкаталоге Packages внутри Xcode Tools. X11 находится под именем X11User.pkg внутри System/Installation/Packages также на первом диске. Если у вас был набор на CD, диски могут различаться. Участники проекта MacPorts рекомендуют использовать наиболее новую версию XCode. Дополнительная информация доступна на странице установки MacPorts. Также у вас должен быть некоторый опыт работы с Terminal.app. Все команды в продолжении этого раздела надо вводить и запускать в Terminal.app.

Необходимые и опциональные пакеты для установкиGwyddion описаны в разделе зависимости при установке. Следующая таблица содержит их названия в двух разных коллекциях программного обеспечения:

Пакет	Fink	MacPorts
Gtk+	gtk+2	gtk2
GtkGLExt	gtkglext1	gtkglext
FFTW3	fftw3	fftw-3
LibXML2	libxml2	libxml2

MacPorts

MacPorts – основанная на ports система переноса и установки программного обеспечения с открытым исходным кодом/программного обеспечения проекта GNU на OS X. Она основана на использовании установочных файлов, т.н. «Portfiles», в которых описаны необходимые шаги по сборке и установке приложений. Таким образом, программное обеспечение легко переносится на OS X с использованием MacPorts, но на каждом компьютере приложения приходится собирать заново. Необходимо загрузить и установить MacPorts. После установки запустите

```
sudo port selfupdate
```

чтобы обновить MacPorts до последней версии.

Обычно установка с помощью MacPorts несложна. Но поскольку X11 не является родным окружением рабочего стола для OS X, дела становятся несколько хуже. Рекомендуется поставить одну из альтернативных версий X11 перед установкой Gwyddion. Рекомендуемые альтернативы - XQuartz на Leopard и xorg-server из системы портов на Tiger. После установки рекомендованной системы X11, Gwyddion может быть собран и установлен просто командой

```
sudo port install gwyddion
```

Чтобы установить xorg-server (на Tiger) просто наберите

```
sudo port install xorg-server
```

это необходимо для работы окон трёхмерного вида на Tiger. После того, как все операции завершатся, иконку запуска можно найти в подменю /Applications/MacPorts.

Fink

Загрузите и установите Fink. После установки запустите

```
apt-get update
```

чтобы обновить список доступных пакетов и установите Gwyddion командой

```
apt-get install gwyddion
```

Чтобы установить Gwyddion из исходных кодов, например, если вы хотите установить версию для разработчиков, вам необходимо установить требуемые пакеты, перечисленные в вышеприведённой таблице и затем следовать общим инструкциям из раздела обустановке под Unix.

Запуск

В системе с MacPorts можно просто нажать иконку запуска и подождать, пока Gwyddion запустится. Используя Fink или самосборную версию, необходимо следовать нижеприведённым инструкциям: запустите X11.app и наберите в Terminal.app

```
export DISPLAY=":0"
```

После этого запустите Gwyddion из того каталога, куда он был установлен. Для Fink это обычно /usr/local/bin. Для Fink, например, нужно запускать

```
/usr/local/bin/gwyddion
```

Также можно настроить X11.app чтобы запускать Gwyddion: найдите X11.app в доке, запустите меню, выберите Приложения, выберите Настроить в следующем меню. Здесь можно выбрать Добавить и ввести имя (например, Gwyddion) как Имя в меню и полный путь к Gwyddion (т.е. /usr/local/bin/gwyddion) как Команду. После этого можно будет выбрать Gwyddion из меню X11.

6.4 Кросс-компиляция для MS Windows

Кросс-компиляция Gwyddion для MS Windows под Linux весьма похожа на обычную сборку для Unix с некоторыми дополнительными настройками и дополнительными шагами. Хотя процесс достаточно тривиален, начальные настройки могут показаться в какой-то степени непростыми. Если вы к тому же не знакомы с обычной сборкой под Unix, имеет смысл начать с неё и попробовать кросс-компиляцию после того, как основная процедура станет понятной.

Эти инструкции описывают компиляцию в дистрибутиве Fedora используя дистрибутивную поддержку кросс-компиляции MinGW, поскольку разработчики Gwyddion используют именно этот вариант. В общем, эти инструкции работают в текущей версии Fedora. Компиляция в других версиях и других основанных на RedHat дистрибутивах (CentOS, Scientific Linux, ...) будет происходить подобным образом и достаточно проста, но возможно потребуются некоторые небольшие изменения. Сборка, например, в openSUSE потребует модификации. Мы будем рады получить отчёты об успешной (или неудачной) сборке на других системах и дополнить эти инструкции.

Полная кросс-компиляция включает в себя следующие шаги:

- настройка для mingw64/mingw32,
- компиляция,
- установка во временный каталог
- создание программы установки используя NSIS.

Доступен скрипт, который автоматически проведёт все шаги, как описано ниже.

Настройка

Перед первой компиляцией может потребоваться настройка среды кросс-компиляции. Это надо делать только один раз.

Основные пакеты MinGW

Запустите с правами суперпользователя root:

```
dnf install mingw{32,64}-{gcc-c++,gtk2,libxml2,minizip,fftw,gtkglext,libwebp, ↩
    OpenEXR}
```

чтобы установить необходимые пакеты mingw32 и mingw64. Некоторые другие пакеты будут установлены как зависимости пакетов, указанных здесь явно. Следует отметить, что технически некоторые из пакетов являются опциональными зависимостями и можно собрать пакет установки для MS Windows без них (после небольшой настройки). Тем не менее, стандартные пакеты установки включают эти зависимости, и скрипты кросс-компиляции подразумевают их наличие по умолчанию.

Репозиторий Gwyddion.net

Версии для MinGW некоторых пакетов, используемых Gwyddion, ещё (или уже) недоступны в Fedora, либо могут быть некоторые исправления, отсутствующие в пакетах Fedora, которые мы хотели бы включить. В настоящее время это HDF5 и gtksourceview2, который используется только в pygwy.

Можно собрать эти опциональные пакеты используя патчи и spec-файлы с https://sourceforge.net/projects/-gwyddion/files/mingw32-cross-compile/, однако, гораздо проще установить их командой dnf. Для этого нужно загрузить и установить пакет конфигурации репозитория gwyddion.net. Установка этого пакета добавит в систему две конфигурации репозитория, для программы и для дополнительных пакетов MinGW. По умолчанию будет включен только репозиторий gwyddion. Для добавления пакетов MinGW нужно включить второй репозиторий вручную редактированием файла /etc/yum.repos.d/gwyddion-mingw.repo. Чтобы установить их необходимо запустить следующую команду:

```
dnf install mingw32-{hdf5,gtksourceview2}
```

Следует отметить, что данный репозиторий переопределяет ряд пакетов MinGW из Fedora чтобы они были нужных версий.

Wine

Wine является слоем совместимости/(не) эмулятором MS Windows для Unix. Он используется для запуска NSIS который создает программу установки Gwyddion для Windows. Wine также можно использовать для запуска и тестирования собранного кросс-компиляцией Gwyddion, как описано ниже.

Запустите

```
dnf install wine
```

чтобы установить Wine.

NSIS

Nullsoft scriptable install system (NSIS) используется для создания программы установки Gwyddion. Поскольку это программа для MS Windows, она устанавливается под Wine. Собранная кросс-компиляцией версия NSIS может присутствовать в некоторых дистрибутивах, но, как показала практика, оригинальная версия работает более надёжно.

Загрузите NSIS с его веб-страницы и запустите informalexample>

```
wine nsis-3.06-setup.exe
```

Python

Чтобы собрать pygwy нужно установить Python в Wine. Это делается так же, как при обычной установке pygwy, за исключением того, что все пакеты, описанные в разделе включение pygwy необходимо устанавливать с помощью команды msiexec: :

```
wine msiexec /i python-2.7.16.msi
wine msiexec /i pygobject-2.28.3.win32-py2.7.msi
wine msiexec /i pycairo-1.8.10.win32-py2.7.msi
wine msiexec /i pygtk-2.24.0.win32-py2.7.msi
```

или подобным образом.

Скрипты поддержки

Скрипты поддержки и данные доступны в модуле mingw32-cross-compile репозитория subversion программы Gwyddion. нужно запустить

```
svn checkout http://svn.code.sf.net/p/gwyddion/code/trunk/mingw32-cross-compile
```

чтобы получить снимок репозитория.

Наиболее важным из полученных вами является скрипт cross-build-32 (или cross-build-64), который автоматизирует все шаги кросс-компиляции. Перед тем, как запускать его в первый раз, просмотрите файл setup32 (или setup64 для 64-битных сборок), который определяет где находятся различные нужные вещи. По умолчанию его содержимое выглядит следующим образом:

```
source_dir=$HOME/Projects/Gwyddion/gwyddion-mingw
mingw_prefix=/usr/i686-pc-mingw32/sys-root/mingw
target_prefix=$HOME/opt/gwyddion-mingw32
python_dir=$HOME/.wine/drive_c/Python27
nsis_compiler=C:\\Program\ Files\ \(x86\)\\NSIS\\makensis.exe
```

Переменная source_dir задаёт место, куда был распакован архив или сохранён снимок системы контроля версий исходного кода Gwyddion и эту переменную скорей всего нужно будет изменить. Переменная target_prefix указывает каталог установки (временный каталог) для собранного кросс-компиляцией Gwyddion. Значение по умолчанию должно работать, и вам не нужно его менять, если вы этого не хотите. Оставшиеся переменные, mingw32_prefix, nsis_compiler и python_dir, задают местоположение файлов MinGW, компилятора NSIS и Win32 Python, соответственно, и их обычно не надо менять со значений по умолчанию, хотя NSIS может быть установлен либо в Program Files (x86), либо в Program Files по умолчанию в зависимости от настроек Wine. Следует отметить, что setup читается оболочкой, и, следовательно, вокруг знака = не должно быть пробелов.

Компиляция

Настройка была утомительной, но это того стоило, поскольку затем компиляция станет крайне простой. Нужно запустить

```
./cross-build-32
```

в каталоге mingw32-cross-compile чтобы собрать пакет установки под Win32. На этом всё. Если процесс создания прошел успешно, выполняемый пакет установки Gwyddion под Windows вместе с предустановленным GTK+ и всем остальным будет создан в каталоге, заданном $target_prefix. Аналогично, пакет установки под Win64 собирается с помощью

```
./cross-build-64
```

Во время сборки можно сделать кофе, или изучить скрипт cross-build (он в действительности достаточно короткий и понятный).

Следует отметить, что скрипт кросс-компиляции запускает autogen.sh, но не чистит каталог с исходным кодом. Вам может понадобиться сделать это вручную если вы постоянно собираете Gwyddion. Особенно это важно, если вы собираете версии под обе архитектуры в одном и том же каталоге, убедитесь, что

```
make distclean
```

был запущен между сборками чтобы привести каталог с исходным кодов в правильное состояние.

Запуск под Wine

Собранный Gwyddion может быть запущен под Wine. Предполагая значение по умолчанию target_prefix:

```
wine ~/opt/gwyddion-mingw32/bin/gwyddion.exe
```

Чтобы запустить gwyddion.exe динамический линкер должен иметь возможность найти все нужные DLL. Это обеспечивается несколько грубым путём в скрипте copysysfiles, который копирует все необходимые файлы MinGW из системы в $target_prefix. Поскольку команда copysysfiles запускается из cross-build обычно не нужно запускать её вручную.

Второй шаг, который может понадобиться, это установка ключа реестра

```
HKEY_LOCAL_MACHINE\Software\Microsoft\Windows\CurrentVersion\App Paths\gwyddion.
    exe
```

таким образом, чтобы он указывал на gwyddion.exe и значения Path, чтобы оно указывало на подкаталог bin.

Кросс-компиляция отдельных модулей

Кросс-компиляция отдельных модулей требует только заголовочные файлы Gwyddion и библиотеки для разработки под Win32. Хотя их гарантированно получить кросс-компиляцией всей программы, делать это необязательно. Компилируя только библиотеки можно обойтись без установки разнообразных редких библиотек, от которых зависит Gwyddion. Это можно сделать используя патч gwyddion-2.22-build-only-libs.patch, который находится вместе со скриптами сборки.

Но ещё проще, библиотеки MinGW Gwyddion доступны как RPM-пакет mingw32-gwyddion-libs в репозитории gwyddion.net.

После того, как всё установлено можно попробовать собрать пример отдельного модуля threshold-example который доступен в репозитории subversion (или в виде пакета исходного кода). См. README там для получения дополнительной информации.

6.5 Компиляция для MS Windows с использованием MinGW

Хотя стандартные исполняемые файлы для MS Windows создаются с помощью кросс-компиляции, также возможно собрать Gwyddion под MS Windows используя порт утилит GNU MinGW на MS Windows. Стандартные исполняемые файлы MS Windows также идут с включенными практическими всеми опциональными возможностями – заметным исключением из которых является поддержка скриптов на Python. Чтобы заставить эти компоненты работать в MS Windows потребуются дополнительные усилия. Однако, наиболее вероятной причиной компиляции на MS Windows является получение всех необходимых файлов для создания отдельных модулей Gwyddion, и для этого применения опциональные компоненты не являются необходимыми.

Процедура в основном такая же, как при нормальной компиляции под Unix. Некоторые специфичные для MinGW замечания ниже.

Сообщалось, что можно успешно использовать сборку Gtk+ 2.24.10. После установки, задайте в оболочке MSYS

```
<b>PKG_CONFIG=ПУТЬ-К-GTK+/gtk+/bin/pkg-config.exe</b>
```

где ПУТЬ-К-GTK+ надо заменить на настоящий каталог установки Gtk+.

Чтобы собрать только библиотеки может оказаться полезным патч gwyddion-2.22-build-only-libs.patch описанный в разделе о кросс-компиляции. В дополнение, похоже что MinGW libintl переопределяет printf() на libintl_printf(), которую, однако, не содержит. Это приводит к сбою компоновки (link) gwyddion.exe. Можно 'исправить' эту ошибку простым удалением include/libintl.h в каталоге Gtk+.

6.6 Компиляция для MS Windows с использованием Microsoft Visual Studio

Установка всего необходимого

Набор всего необходимого для сборки с помощью Visual Studio можно скачать отсюда.

Решение

Скопируйте каталог msvc2015 в каталог исходного кода gwyddion (каталог /trunk/gwyddion в svn, в дальнейшем для простоты мы будем называть его просто gwyddion).

Сгенерированные файлы

Скопируйте содержимое каталога generated-files в каталог gwyddion

Python 2.7

Установите Python 2.7. Версия 2.7.11 не работает. Последняя стабильная версия Python 2.7.9. пакеты установки python находятся в каталоге libs-install. Установите их в каталоги C:\libs\Python\Win32 и C:\libs\Python\x64. Из-за того, что файл python27_d.lib отсутствует, не получится связать проект с библиотекой отладки Python. Задание переменных MS_NO_COREDLL, Py_NO_ENABLE_SHARED и SWIG_PYTHON_INTERPRETER_NO_DEBUG в данном случае не помогает.

Как исправить:

- скопируйте python27.lib в каталог python27_d.lib
- в pyconfig.h закомментируйте define Py_DEBUG

python27_d.lib и pyconfig.h находятся в каталоге libs\Python27 поэтому их можно просто скопировать в каталог C:\libs\Python27.

Библиотеки

Gwyddion зависит от внешних библиотек. Необходимо установить пути к библиотекам как переменные окружения среды. Пути должны заканчиваться символом обратной косой черты '\'. Стабильные версии этих библиотек находятся в каталоге libs. Пример установки переменных окружения приведён ниже:

```
CFITSIO_DIR = C:\libs\cfitsio\
GTK_DIR = C:\libs\Gtk\
GTKGLEXT_DIR = C:\libs\GetGLExt\
LIBICONV_DIR = C:\libs\libiconv\
LIBXML_DIR = C:\libs\libxml\
PYTHON_DIR = C:\libs\Python27\
ZLIB_DIR = C:\libs\zlib\
```

'События сборки'

Частью сборки проекта будет копирование всех файлов, необходимых для запуска Gwyddion. Отдельные файлы копируются из каталога gwyddion в каталог $(OutDir) (или в соответствующий подкаталог). Файлы динамически связываемых библиотек (DLL) копируются в каталог $(OutDir) из путей к внешним библиотекам, заданным как переменные окружения. Команды доступны через пункт меню Project/Properties/Build Events/Post-Build Event.

Генерация решений

Gwyddion собирается под Linux с использованиемautotools. Преобразование процедур условной компиляции между различными платформами (особенно такой самобытной, как Windows) являются весьма нетривиальными (условия, зависимости, раскрытие переменных, различные файлы настроек в Linux/Windows вследствие различий в наборе доступных библиотек). Все эти особенности практически исключают возможность автоматического преобразования.

gen-gwyddion-msvc-sln.py это скрипт, генерирующий решение и проекты Visual Studio. Скрипт необходимо поместить в каталог gwyddion (см. выше). Gwyddion нужно сначала скомпилировать под Linux из этого каталога перед запуском скрипта. Компиляция под Linux создаёт недостающие необходимые файлы .c и .h и позволяет генерировать экспортируемые файлы функций (.def). Эти файлы необходимы для сборки под Windows. Они сортируются в каталог generated-files и должны быть скопированы в каталог gwyddion под Windows. Скрипт создаёт файлы решения Visual Studio (solution) и проекты (projects) которые генерируются в каталоге msvc2015. Все генерируемые скриптом каталоги создаются внутри каталога gwyddion.

Файлы config.h и gwyconfig.h создаются при компиляции под Linux с помощью autotools. Они соответствуют Linux-окружению и должны быть изменены чтобы можно было собрать проект с помощью Visual Studio. Подготовленные файлы конфигурации, совместимые с Windows являются частью скрипта. Эти файлы копируются в каталог generated-files в процессе работы генерирующего скрипта.

Процедура:

Компиляция на машине с Linux

На машине с Linux. Запустите ./autogen.sh и make в каталоге с исходным кодом (обычно gwyddion). См. раздел Сборка в среде Linux/Unix.

Запустите скрипт, чтобы создать файлы решения (solution) и скопируйте сгенерированные файлы.

На машине с Linux. Запустите gen-gwyddion-msvc-sln.py gwyddion в каталоге gwyddion.

Генерируемый каталог	Содержание
msvc2015	Gwyddion Solution
msvc2015/generated-files	файлы .def, .c, .h

Необходимо скопировать все файлы и каталоги из ./msvc2015/generated-files на машине с Linux в ./gwyddion на машине с Windows.

Установка

Под Windows. См. раздел Установка всего необходимого.

6.7 Снимок Subversion, Разработка

Gwyddion использует систему контроля версий Subversion для управления ревизиями исходного кода. Организация репозитория описана на страницах проекта. Например, последнюю ревизию самой программы можно получить из системы контроля версий командой

```
svn checkout http://svn.code.sf.net/p/gwyddion/code/trunk/gwyddion
```

Репозиторий не содержит никаких генерируемых файлов, независимо от того, насколько экзотичные инструменты могут понадобиться для их генерации. Следовательно, требуется использование дополнительных пакетов, для сборки свежего снимка. Также существуют определённые ограничения платформы. Дополнительные инструменты и пакеты которые нужны для разработки те же, что нужны при сборке из снимка Subversion. Точнее, все инструменты нужны для сборки из свежего снимка, в то время, как разработка может требовать только их подмножество или вообще не требовать, в зависимости от типа и масштаба изменений исходного кода.

Дополнительные зависимости для сборки версии для разработчиков

- GNU autoconf $\geq$ 2.60
- GNU automake $\geq$ 1.11
- GNU libtool $\geq$ 1.4
- Python $\geq$ 2.4
- gtk-doc $\geq$ 1.12
- GNU gettext $\geq$ 0.12, включая средства для разработки
- Inkscape $\geq$ 0.91
- xsltproc
- Epydoc
- pngcrush $\geq$ 1.8.9
- скорее всего версии GNU для большинства инструментов: компилятор, binutils, ...

После загрузки свежего снимка, запустите ./autogen.sh с теми же аргументами, которые вы хотели бы передать configure. Следует отметить. что автоматически добавляются опции --enable-maintainer-mode и --enable-gtk-doc, чтобы убедиться, чт оправила создания и обновления различных файлов будут активны. В общем случае нужно использовать эту опцию configure каждый раз, когда вы собираетесь изменить исходный код программы нетривиальным путём.

На некоторых системах autogen.sh может закончиться с ошибкой даже если у вас установлены требуемые версии autotools. Эти системы не устанавливают общие команды autoconf или automake, а делят их на версии, вроде autoconf261 или automake19. Найти, например, «automake1.9 или новее» без знания насколько новым он может быть будет весьма нетривиальной задачей. Следовательно, autogen.sh даже не пытается этого сделать. Можно или создать не содержащие версий символические ссылки на команды с версиями или запустить autogen.sh следующим образом: AUTOCONF=autoconf261 AUTOHEADER=autoheader261 ./autogen.sh Может потребоваться установка следующих переменных: ACLOCAL, AUTOCONF, AUTOHEADER, AUTOM4TE, AUTOMAKE, LIBTOOLIZE. Дополнительно, некоторые операционные системы могут установить макрос autoconf в такое место, где aclocal по умолчанию их не найдёт. Это может быть исправлено установкой переменной ACLOCAL_FLAGS, где будут указаны дополнительные пути поиска для aclocal: ACLOCAL_FLAGS="-I /usr/local/share/aclocal" ./autogen.sh

Нередко требуется комбинировать эти настройки. Например, на FreeBSD, где все инструменты разделены по версиям, обычно требуется выполнить (разбито на строки для простоты чтения):

```
AUTOCONF=autoconf261 \
AUTOHEADER=autoheader261 \
AUTOM4TE=autom4te261 \
AUTOMAKE=automake19 \
ACLOCAL=aclocal19 \
ACLOCAL_FLAGS="-I /usr/local/share/aclocal" \
CPPFLAGS=-I/usr/local/include \
LDFLAGS=-L/usr/local/lib \
./autogen.sh --prefix=...
```

Если autogen.sh заканчивается удачно, далее программу можно собирать как обычно.

MS Windows

Поскольку стандартный метод создания исполняемых файлов MS Windows состоит в кросс-компиляции в Linux, рекомендуемый способ разработки для MS Windows также состоит в сборке под Linux. Это можно делать как на физически другом компьютере используя ssh, так и на виртуальной машине запущенной на том же компьютере, что и основная система MS Windows. В обоих случаях каталоги сборки Gwyddion (и другие каталоги) могут быть общими для Linux и MS Windows используя либо Samba, либо механизм общих каталогов виртуальной машины. Собранные таким образом исполняемые файлы можно сразу тестировать в MS Windows не перенося их туда и обратно.

6.8 Разработка Gwyddion

Мы приглашаем вас стать одним из разработчиков Gwyddion.

Если вы хотите стать разработчиком, мы рекомендуем начать с некоторых простых модулей (см. руководство по написанию модуля), чтобы посмотреть, как работает приложение. Если вы написали модуль, мы будем рады, если вы поделитесь им с другими пользователями Gwyddion. Дайте нам знать, чтобы мы могли дать ссылку на ваш модуль или включить его в состав Gwyddion. Вам не обязательно ограничиваться модулями, но начать написание проще с них.

Руководства по API

Есть множество функций, которые могут помочь вам написать ваш модуль. См. руководство по API в разделе документации на сайте проекта.

Сообщения об ошибках

Мы будем рады, если вы будете посылать нам сообщения об ошибках, которые вы нашли в Gwyddion. Желательно при этом указывать как можно больше сведений о ситуации, которая привела к ошибке, а также используемой операционной системе и версии Gwyddion. Также можно переслать нам данные СЗМ, которые обрабатывались в то время, когда была обнаружена ошибка, это особенно необходимо для сообщений об ошибках, связанных с загрузкой и сохранением файлов.

Предпочитаемый способ отправки сообщений об ошибках — электронной почтой на адрес klapetek@gwyddion.net.

Глава 7

GNU General Public License (Универсальная общественная лицензия GNU)

Версия 2, июнь 1991 г.

Copyright © 1989, 1991 Free Software Foundation, Inc.

Free Software Foundation, Inc. 51 Franklin Street, Fifth Floor, Boston, MA02110-1301USA

Каждый вправе копировать и распространять экземпляры настоящей Лицензии без внесения изменений в ее текст.

Версия 2, июнь 1991г.

Это неофициальный русский перевод Универсальной Общественной Лицензии GNU. Он не был опубликован Фондом Свободного ПО и не устанавливает законные условия распространения ПО, использующего GNU GPL, что делает только оригинальный английский текст GNU GPL. Однако мы надеемся, что этот перевод поможет людям, говорящим на русском языке, лучше понять GNU GPL.

This is an unofficial translation of the GNU General Public License into Russian. It was not published by the Free Software Foundation, and does not legally state the distribution terms for software that uses the GNU GPL - only the original English text of the GNU GPL does that. However, we hope that this translation will help Russian speakers understand the GNU GPL better.

Оригинальный текст GNU GPL на английском языке вы можете прочитать на сайте: https://www.gnu.org/-copyleft/gpl.html.

7.1 Преамбула

Лицензии на большую часть программного обеспечения (ПО), составлены так, чтобы лишить вас свободы совместно использовать и изменять это ПО. Напротив, назначением Универсальной Общественной Лицензии GNU является гарантия вашей свободы совместно использовать и изменять свободное ПО, т.е. убедительно показать, что ПО является свободным для всех его пользователей. Эта Универсальная Общественная Лицензия применима к большей части ПО Фонда Свободного ПО и ко всем другим программам, чьи авторы принимают на себя обязательства ее использовать. (Вместо нее для части ПО Фонда Свободного ПО применяется Универсальная Общественная Лицензия GNU для библиотек.) Вы тоже можете использовать ее для своих программ.

Говоря о свободном программном обеспечении, мы имеем в виду свободу, а не бесплатность. Настоящая Стандартная Общественная Лицензия разработана с целью гарантировать вам право распространять экземпляры свободного программного обеспечения (и при желании получать за это вознаграждение), право получать исходный текст программного обеспечения или иметь возможность его получить, право вносить изменения в программное обеспечение или использовать его части в новом свободном программном обеспечении, а также право знать, что вы имеете все вышеперечисленные права.

Чтобы защитить ваши права, нам нужно ввести такие ограничения, которые запретят кому бы то ни было отказывать вам в этих правах или потребовать от вас отказаться от этих прав. Эти ограничения переходят в некоторые обязательства для вас, если вы распространяете копии ПО или если вы модифицируете его.

Например, если вы распространяете экземпляры такого программного обеспечения за плату или бесплатно, вы обязаны передать новым обладателям все права в том же объеме, в каком они принадлежат вам. Вы обязаны обеспечить получение новыми обладателями программы ее исходного текста или возможность его получить. Вы также обязаны ознакомить их с условиями настоящей Лицензии.

Мы защищаем ваши права в два этапа:

1. сохраняем авторские права на программное обеспечение и

2. предлагаем вам эту лицензию, которая дает вам законное право копировать, распространять и/или модифицировать программное обеспечение.

Кроме того, для защиты как нашей репутации, так и репутации других авторов программного обеспечения, мы уведомляем всех пользователей, что на данное программное обеспечение никаких гарантий не предоставляется. Те, кто приобрел программное обеспечение, с внесенными в него третьими лицами изменениями, должны знать, что они получают не оригинал, в силу чего автор оригинала не несет ответственности за ошибки в работе программного обеспечения, допущенные третьими лицами при внесении изменений.

Наконец, программное обеспечение перестает быть свободным в случае, если лицо приобретает на него исключительные права. Недопустимо, чтобы лица, распространяющие свободное программное обеспечение, могли приобрести исключительные права на использование данного программного обеспечения и зарегистрировать их в Патентном ведомстве. Чтобы избежать этого, мы заявляем, что обладатель исключительных прав обязан предоставить любому лицу права на использование программного обеспечения либо не приобретать исключительных прав вообще.

Ниже изложены условия воспроизведения, распространения и модификации программного обеспечения.

7.2 Условия воспроизведения, распространения и модификации

Раздел 0

Эта Лицензия применима к любой программе или другому произведению, содержащему уведомление, помещенное держателем авторских прав и сообщающее о том, что оно может распространяться при условиях, оговоренных в данной Универсальной Общественной Лицензии. В последующем термин «Программа» относится к любой такой программе или произведению, а термин «произведение, основанное на Программе» означает Программу или любое произведение, содержащее Программу или ее часть, дословную, или модифицированную, и/или переведенную на другой язык. (Здесь и далее перевод включается без ограничений в понятие «модификация».) Каждый обладатель лицензии адресуется как «вы».

Виды деятельности, не являющиеся копированием, распространением или модификацией не охватываются этой Лицензией; они за пределами ее влияния. Использование Программы по ее функциональному назначению не ограничено, и выходные данные Программы охватываются этой Лицензией, только если их содержание является произведением, основанным на Программе (вне зависимости от того, были ли они получены в процессе использования Программы). Являются ли они таковыми, зависит от того, что что именно делает Программа.

Раздел 1

Вы можете копировать и распространять дословные копии исходного кода Программы по его получении на любом носителе, при условии что вы соответствующим образом помещаете на видном месте в каждой копии соответствующее уведомление об авторских правах и отказ от гарантий; оставляете нетронутыми все уведомления, относящиеся к данной Лицензии и к отсутствию каких-либо гарантий; и передаете всем другим получателям Программы копию данной Лицензии вместе с Программой.

Вы можете назначить плату за физический акт передачи копии и можете по своему усмотрению предоставлять гарантии за вознаграждение.

Раздел 2

Вы можете изменять свою копию или копии Программы или любой ее части, создавая таким образом произведение, основанное на Программе, и копировать и распространять эти модификации или произведение в соответствии с Разделом 1, приведенным выше, при условии, что вы выполните все нижеследующие условия:

1. Вы обязаны снабдить модифицированные файлы заметными уведомлениями, содержащими указания на то, что вы изменили файлы, и дату каждого изменения.
2. Вы обязаны предоставить всем третьим лицам лицензию на бесплатное использование каждого произведения, которое вы распространяете или публикуете, целиком, и которое полностью или частично содержит Программу или какую-либо ее часть, на условиях, оговоренных в данной Лицензии.
3. Если модифицированная программа обычно читает команды в интерактивном режиме работы, вы должны сделать так, чтобы при запуске для работы в таком интерактивном режиме обычным для нее способом она печатала или выводила на экран объявление, содержащее соответствующее уведомление об авторских правах и уведомление о том, что гарантий нет (или, наоборот, сообщающее о том, что вы обеспечиваете

гарантии), и что пользователи могут повторно распространять программу при этих условиях, и указывающее пользователю, как просмотреть копию данной Лицензии. (Исключение: если сама Программа работает в интерактивном режиме, но обычно не выводит подобное объявление, то ваше произведение, основанное на Программе, не обязано выводить объявление.)

Эти требования применяются к модифицированному произведению в целом. Если известные части этого произведения не были основаны на Программе и могут обоснованно считаться независимыми и самостоятельными произведениями, то эта Лицензия и ее условия не распространяются на эти части, если вы распространяете их как отдельные произведения. Но если вы распространяете эти части как часть целого произведения, основанного на Программе, то вы обязаны делать это в соответствии с условиями данной Лицензии, распространяя права получателей лицензии на все произведение и, таким образом, на каждую часть, вне зависимости от того, кто ее написал.

Таким образом, содержание этого раздела не имеет цели претендовать на ваши права на произведение, написанное полностью вами, или оспаривать их; цель скорее в том, чтобы развить право управлять распространением производных или коллективных произведений, основанных на Программе.

Кроме того, простое нахождение другого произведения, не основанного на этой Программе, совместно с Программой (или с произведением, основанным на этой Программе) на том же носителе для постоянного хранения или распространяемом носителе не распространяет действие этой Лицензии на другое произведение.

Раздел 3

Вы можете копировать и распространять Программу (или произведение, основанное на ней) согласно Разделу 2) в объектном коде или в выполнимом виде в соответствии с Разделами 1 и 2, приведенными выше, при условии, что вы также выполните одно из следующих требований:

1. Сопроводите ее полным соответствующим машиночитаемым исходным кодом, который должен распространяться в соответствии с Разделами 1 и 2, приведенными выше, на носителе, обычно используемом для обмена ПО; или,
2. Сопроводите ее письменным предложением, действительным по крайней мере в течение трех лет, предоставить любому третьему лицу за вознаграждение не большее стоимости физического акта изготовления копии полную машиночитаемую копию соответствующего исходного кода, подлежащую распространению в соответствии с Разделами 1 и 2, приведенными выше; или
3. Сопроводите ее информацией, полученной вами в качестве предложения распространить соответствующий исходный код. (Эта возможность допустима только для некоммерческого распространения, и только если вы получили программу в объектном коде или в выполнимом виде с предложением в соответствии с Пунктом b) выше.)

Исходный код для призведения означает его вид, предпочтительный для выполнения в нем модификаций. Для исполняемого произведения полный исходный код означает все исходные коды для всех модулей, которые он содержит, плюс любые связанные с произведением файлы определения интерфейса, плюс сценарии, используемые для управления компиляцией и установкой исполняемого произведения. Однако, в виде особого исключения распространяемый исходный код не обязан включать то, что обычно предоставляется с основными компонентами операционной системы, под управлением которой работает исполняемое произведение, за исключением случая, когда сам компонент сопровождает исполняемое произведение.

Если распространение исполняемого произведения или объектного кода происходит путем предоставления доступа для копирования с обозначенного места, то предоставление доступа для копирования исходного кода с того же места считается распространением исходного кода, даже если третьи лица не принуждаются к копированию исходного кода вместе с объектным кодом.

Раздел 4

Вы не можете копировать, изменять, повторно лицензировать, или распространять Программу иначе, чем это явно предусмотрено данной Лицензией. Любая попытка копировать, изменять, повторно лицензировать, или распространять Программу каким-либо другим способом неправомерна и автоматически прекращает ваши права данные вам этой Лицензией. Однако лицензии лиц, получивших от вас копии или права согласно данной Универсальной Общественной Лицензии, не прекратят своего действия до тех пор, пока эти лица полностью соблюдают условия.

Раздел 5

Вы не обязаны соглашаться с этой Лицензией, так как вы не подписывали ее. Однако тогда вы не получаете права модифицировать или распространять Программу или основанные на Программе произведения. Эти действия запрещены законом, если вы не принимаете к соблюдению эту Лицензию. А значит, изменяя или распространяя Программу (или произведение, основанное на Программе), вы изъявляете свое согласие с этой Лицензией и всеми ее условиями о копировании, распространении или модификации Программы или произведений, основанных на ней.

Раздел 6

Каждый раз, когда вы повторно распространяете Программу (или любое произведение, основанное на Программе), получатель автоматически получает лицензию от первоначального держателя лицензии на копирование, распространение или модификацию Программы, обсуждаемую в этих определениях и условиях. Вы не можете налагать каких-либо дополнительных ограничений на осуществление получателем прав, предоставленных данным документом. Вы не несете ответстенности за соблюдение третьими лицами условий этой Лицензии.

Раздел 7

Если в результате судебного разбирательства, или обвинения в нарушении патента или по любой другой причине (не обязательно связанной с патентами), вам навязаны условия, противоречащие данной Лицензии (как по решению суда, так и нет), то это не освобождает вас от соблюдения Лицензии. Если вы не можете заниматься распространением так, чтобы одновременно удовлетворить требованиям и этой Лицензии, и всем другим требованиям, то вы не должны заниматься распространением Программы. Например, если патент не позволяет безвозмездное повторное распространение Программы всем, кто получил копии от вас непосредственно или через посредников, то единственным способом удовлетворить и патенту, и этой Лицензии будет ваш полный отказ от распространения Программы.

Если какая-либо часть этого раздела не имеет силы или не может быть применена при любых конкретных обстоятельствах, то подразумевается, что имеет силу остальная часть раздела, и весь Раздел имеет силу при других обстоятельствах.

Цель этого раздела не побудить вас делать заявления о нарушениях прав на патент, или других претензиях на право собственности, или оспаривать правильность подобных претензий; единственная цель этого раздела - защита целостности системы распространения свободного ПО, которая реализуется использованием общих лицензий. Многие люди благодаря этой системе внесли щедрый вклад в широкий спектр распространяемого ПО полагаясь на согласованное применение этой системы; автору принадлежит право решать хочет ли он или она распространять ПО в этой системе или в какой-то другой, и получатель лицензии не может влиять на принятие этого решения.

Этот раздел предназначен для того, чтобы тщательно прояснить, что полагается следствием из остальной части данной Лицензии.

Раздел 8

Если распространение и/или применение Программы ограничено в ряде стран либо патентами, либо авторскими правами на интерфейсы, первоначальный обладатель авторских прав, выпускающий Программу с этой Лицензией, может добавить явное ограничение на географическое распространение, исключив такие страны, так что распространение разрешается только в тех странах, которые не были исключены. В этом случае данная Лицензия включает в себя это ограничение, как если бы оно было написано в тексте данной Лицензии.

Раздел 9

Фонд Свободного Програмного Обеспечения может время от времени публиковать пересмотренные и/или новые версии Универсальной Общественной Лицензии. Такие новые версии будут сходны по духу с настоящей версией, но могут отличаться в деталях, направленных на новые проблемы или обстоятельства.

Каждой версии придается отличительный номер версии. Если в Программе указан номер версии данной Лицензии, которая к ней применима, и слова «любая последующая версия», вы можете по выбору следовать определениям и условиям либо данной версии, либо любой последующей версии, опубликованной Фондом Свободного ПО. Если в Программе не указан номер версии данной Лицензии, вы можете выбрать любую версию, когда-либо опубликованную Фондом Свободного ПО.

Раздел 10

Если вы хотите встроить части Программы в другие свободные программы с иными условиями распространения, напишите автору с просьбой о разрешении. Для ПО, которое охраняется авторскими правами Фонда Свободного ПО, напишите в Фонд Свободного ПО; мы иногда делаем исключения для этого. Наше решение будет руководствоваться двумя целями: сохранения свободного статуса всех производных нашего свободного ПО и содействия совместному и повторному использованию ПО вообще.

Раздел 11. ОТКАЗ ОТ ГАРАНТИЙ

ПОСКОЛЬКУ ПРОГРАММА ПРЕДОСТАВЛЯЕТСЯ БЕСПЛАТНО, НА ПРОГРАММУ НЕТ ГАРАНТИЙ В ТОЙ МЕРЕ, КАКАЯ ДОПУСТИМА ПРИМЕНИМЫМ ЗАКОНОМ. ЗА ИСКЛЮЧЕНИЕМ ТЕХ СЛУЧАЕВ, КОГДА ПРОТИВНОЕ ЗАЯВЛЕНО В ПИСЬМЕННОЙ ФОРМЕ, ДЕРЖАТЕЛИ АВТОРСКИХ ПРАВ И/ИЛИ ДРУГИЕ СТОРОНЫ ПОСТАВЛЯЮТ ПРОГРАММУ «КАК ОНА ЕСТЬ» БЕЗ КАКОГО-ЛИБО ВИДА ГАРАНТИЙ, ВЫРАЖЕННЫХ ЯВНО ИЛИ ПОДРАЗУМЕВАЕМЫХ, ВКЛЮЧАЯ, НО НЕ ОГРАНИЧИВАЯСЬ ПОДРАЗУМЕВАЕМЫМИ ГАРАНТИЯМИ КОММЕРЧЕСКОЙ ЦЕННОСТИ И ПРИГОДНОСТИ ДЛЯ КОНКРЕТНОЙ ЦЕЛИ. ВЕСЬ РИСК В ОТНОШЕНИИ КАЧЕСТВА И ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ ПРОГРАММЫ ОСТАЕТСЯ ПРИ ВАС. ЕСЛИ ПРОГРАММА ОКАЖЕТСЯ ДЕФЕКТИВНОЙ, ВЫ ПРИНИМАЕТЕ НА СЕБЯ СТОИМОСТЬ ВСЕГО НЕОБХОДИМОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ, ВОССТАНОВЛЕНИЯ ИЛИ ИСПРАВЛЕНИЯ.

Раздел 12

И В КОЕМ СЛУЧАЕ, ЕСЛИ НЕ ТРЕБУЕТСЯ ПОДХОДЯЩИМ ЗАКОНОМ ИЛИ НЕ УСЛОВЛЕНО В ПИСЬМЕННОЙ ФОРМЕ, НИКАКОЙ ДЕРЖАТЕЛЬ АВТОРСКИХ ПРАВ ИЛИ НИКАКОЕ ДРУГОЕ ЛИЦО, КОТОРОЕ МОЖЕТ ИЗМЕНЯТЬ И/ИЛИ ПОВТОРНО РАСПРОСТРАНЯТЬ ПРОГРАММУ, КАК БЫЛО РАЗРЕШЕНО ВЫШЕ, НЕ ОТВЕТСТВЕННЫ ПЕРЕД ВАМИ ЗА УБЫТКИ, ВКЛЮЧАЯ ЛЮБЫЕ ОБЩИЕ, СПЕЦИАЛЬНЫЕ, СЛУЧАЙНЫЕ ИЛИ ПОСЛЕДОВАВШИЕ УБЫТКИ, ПРОИСТЕКАЮЩИЕ ИЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИЛИ НЕВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРОГРАММЫ (ВКЛЮЧАЯ, НО НЕ ОГРАНИЧИВАЯСЬ ПОТЕРЕЙ ДАННЫХ, ИЛИ ДАННЫМИ, СТАВШИМИ НЕПРАВИЛЬНЫМИ, ИЛИ ПОТЕРЯМИ, ПОНЕСЕННЫМИ ИЗ-ЗА ВАС ИЛИ ТРЕТЬИХ ЛИЦ, ИЛИ ОТКАЗОМ ПРОГРАММЫ РАБОТАТЬ СОВМЕСТНО С ЛЮБЫМИ ДРУГИМИ ПРОГРАММАМИ), ДАЖЕ ЕСЛИ ТАКОЙ ДЕРЖАТЕЛЬ ИЛИ ДРУГОЕ ЛИЦО БЫЛИ ИЗВЕЩЕНЫ О ВОЗМОЖНОСТИ ТАКИХ УБЫТКОВ.

КОНЕЦ ОПРЕДЕЛЕНИЙ И УСЛОВИЙ

7.3 Как применять эти условия к вашим новым программам

Если вы разрабатываете новую программу и хотите, чтобы она принесла максимально возможную пользу обществу, лучший способ достичь этого - включить ее в свободное ПО, которое каждый может повторно распространять и изменять согласно данным условиям.

Чтобы сделать это, добавьте в программу следующие уведомления. Самое безопасное - это добавить их в начало каждого исходного файла, чтобы наиболее эффективно отобразить исключение гарантий; и каждый файл должен содержать по меньшей мере строку, содержащую «знак охраны авторского права» и указание на то, где находится полное уведомление.

```
<one line to give the program's name and a brief idea of what it does.>
Copyright (C) <year>  <name of author>
This program is free software; you can redistribute it and/or modify
it under the terms of the GNU General Public License as published by
the Free Software Foundation; either version 2 of the License, or
(at your option) any later version.

This program is distributed in the hope that it will be useful,
but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of
MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.  See the
GNU General Public License for more details.

You should have received a copy of the GNU General Public License along
with this program; if not, write to the Free Software Foundation, Inc.,
51 Franklin Street, Fifth Floor, Boston, MA  02110-1301, USA
```

Также укажите, как можно связаться с вами по электронной или обычной почте.

Если программа работает в интерактивном режиме, сделайте так, чтобы при запуске в интерактивном режиме выводилось короткое сообщение в соответствии с образцом:

```
Gnomovision version 69, Copyright (C) year name of author Gnomovision
comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY; for details type "show w".
This is free software, and you are welcome to redistribute it under
certain conditions; type "show c" for details.
```

При введении предлагаемых команд "show w" и "show c" на экран должны выводиться соответствующие пункты Стандартной Общественной Лицензии. Не обязательно использовать именно команды "show w" и "show c". В зависимости от функций программы, команды могут вызываться нажатием кнопки мыши или быть добавлены в меню программы.

Если вы создали программу в порядке выполнения служебных обязанностей или служебного задания работодателя либо для образовательного учреждения (школы, ВУЗа и т.д.) в период обучения или работы в данном образовательном учреждении, вам следует получить в случае необходимости письменный отказ от исключительных прав на использование данной программы. Нижеприведенный текст вы можете использовать в качестве образца, заменив соответствующие имена и наименования:

```
Компания "Братья Юдины" настоящим отказывается от всех имущественных
прав на программу «»Gnomovision (которая делает пассы в сторону
компиляторов), написанную Абстрактным, К.И.

<подпись: Маг Нат>, 1 апреля 1989 г
Маг Нат, Президент фирмы Вице.
```

Стандартная Общественная Лицензия GNU запрещает включать вашу программу в программы, использование которых ограничено их правообладателями. Если ваша программа является библиотекой подпрограмм, вероятно, более полезным будет разрешить связывание программ, использование которых ограничено их правообладателями, с вашей библиотекой. В этом случае вам следует использовать Стандартную Общественную Лицензию GNU для Библиотек вместо настоящей Лицензии.

Глава 8

GNU Free Documentation License

Версия 1.2, ноябрь 2002

Copyright © 2000,2001,2002 Free Software Foundation, Inc.

Free Software Foundation, Inc. 51 Franklin Street, Fifth Floor, Boston, MA 02110-1301, USA

Каждый вправе копировать и распространять экземпляры настоящей Лицензии без внесения изменений в ее текст.

Версия 1.2, ноябрь 2002

This is an unofficial translation of the GNU Free Documentation License (GFDL) into Russian. It was not published by the Free Software Foundation, and does not legally state the distribution terms for works that uses the GFDL - only the original English text of the GFDL does that. However, we hope that this translation will help Russian speakers understand the GFDL better.

Это неофициальный перевод Лицензии Свободной Документации GNU (GFDL) на русский язык. Он опубликован не Фондом Свободного Программного обеспечения и не устанавливает условий, имеющих юридическую силу, для продуктов, распространяемых на условиях GFDL. Условия, имеющие юридическую силу, закреплены исключительно в англоязычном тексте GFDL. Тем не менее, мы надеемся, что этот перевод поможет русскоязычным пользователям лучше понять содержание GFDL.

Текст GFDL на английском языке вы можете прочитать здесь: https://www.gnu.org/copyleft/fdl.html.

8.1 ПРЕАМБУЛА

Цель настоящей Лицензии - сделать свободными справочники, руководства пользователя или иные функциональные и полезные документы в письменной форме, то есть обеспечить каждому право свободно копировать и распространять как с изменениями, так и без изменений, за вознаграждение или бесплатно указанные документы. Настоящая Лицензия также позволяет авторам или издателям документа сохранить свою репутацию, не принимая на себя ответственность за изменения, сделанные третьими лицами.

Настоящая Лицензия относится к категории «copyleft». Это означает, что все произведения, производные от документа, должны быть свободными в соответствии с концепцией «copyleft». Настоящая Лицензия дополняет General Public License GNU, которая является лицензией «copyleft», разработанной для свободного программного обеспечения.

Настоящая Лицензия разработана для применения ее к документации на свободное программное обеспечение, поскольку свободное программное обеспечение должно сопровождаться свободной документацией. Пользователь должен обладать теми же правами в отношении руководства пользователя, какими он обладает в отношении свободного программного обеспечения. При этом действие настоящей Лицензии не распространяется только на руководство пользователя. Настоящая Лицензия может применяться к любому текстовому произведению независимо от его темы или от того, издано ли данное произведение в виде печатной книги или нет. Настоящую Лицензию рекомендуется применять для произведений справочного или обучающего характера.

8.2 СФЕРА ДЕЙСТВИЯ, ТЕРМИНЫ И ИХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Условия настоящей Лицензии применяются к любому руководству пользователя или иному произведению на любом носителе, которое в соответствии с уведомлением, помещенным правообладателем, может распространяться на условиях настоящей Лицензии. Таковое уведомление предоставляет всемирную, свободную от выплат и неограниченную по сроку действия лицензию на использование такового произведения на определённых в данном соглашении условиях. Далее под термином «Документ» понимается любое подобное руководство пользователя или произведение. Лицо, которому передаются права по настоящей Лицензии, в дальнейшем именуется

«Лицензиат». Лицензиат принимает условия этой лицензии если он копирует, модифицирует или распространяет произведение способом, требующим разрешения в соответствии с законодательством об авторском праве.

«Модифицированная версия Документа» - любое произведение, содержащее Документ или его часть, скопированные как с изменениями, так и без них и/или переведенные на другой язык.

«Второстепенный раздел» - имеющее название приложение или предисловие к Документу, в котором отражено исключительно отношение издателей или авторов Документа к его содержанию в целом, либо к вопросам, связанным с содержанием Документа. Второстепенный раздел не может включать в себя то, что относится непосредственно к содержанию Документа. (То есть, если Документ является частью учебника по математике, во Второстепенном разделе не может содержаться что-либо имеющее отношение непосредственно к математике). Во Второстепенных разделах могут быть затронуты вопросы истории того, что составляет содержание или что связано с содержанием Документа, а также правовые, коммерческие, философские, этические или политические взгляды относительно содержания Документа.

«Неизменяемые разделы» - определенные Второстепенные разделы, названия которых перечислены как Неизменяемые разделы в уведомлении Документа, определяющем лицензионные условия. Если раздел не удовлетворяет приведённому выше определению Второстепенного раздела, то он не может быть назван Неизменяемым. Документ может не содержать Неизменяемых разделов. В случае, если в Документе не перечисляются какие бы то ни было неизменяемые разделы, то такие разделы отсутствуют.

«Текст, помещаемый на обложке» - определенные краткие строки текста, которые перечислены в уведомлении Документа, определяющем лицензионные условия, как текст, помещаемый на первой и последней страницах обложки. Текст, помещаемый на первой странице обложки, не может быть длиннее 5 слов, а текст, помещаемый на последней странице обложки, не может содержать более 25 слов.

«Прозрачный» экземпляр Документа - экземпляр Документа в машиночитаемой форме, представленный в формате с общедоступной спецификацией, подходящим для просмотра и исправлений, при условии, что документ может просматриваться и редактироваться непосредственно с помощью общедоступных текстовых редакторов или общедоступных программ для векторной или растровой графики (в случае, если в документе содержатся изображения векторной или растровой графики). Указанный формат должен обеспечить ввод текста Документа в программы форматирования текста или автоматический перевод Документа в различные форматы, подходящие для ввода текста Документа в программы форматирования текста. Экземпляр Документа, представленный в ином формате, разметка или отсутствие разметки которого затрудняет или препятствует внесению в Документ последующих изменений пользователями, не является Прозрачным. Графический формат не является Прозрачным, если он применён для сколько-нибудь значительного количества текста. Экземпляр документа, не являющийся Прозрачным, называется «Непрозрачным».

Форматы, в которых может быть представлен Прозрачный экземпляр Документа, включают простой формат ASCII без разметки, формат ввода Texinfo, формат ввода LaTeX, SGML или XML с использованием общедоступного DTD, а также соответствующий стандартам простой формат HTML, PostScript и PDF, предназначений для внесения модификаций человеком. В число графических форматов, являющихся Прозрачными, входят PNG, XCF и JPG. «Непрозрачные» форматы включают в себя форматы, которые можно прочитать и редактировать только с помощью текстовых редакторов, права на использование которых свободно не передаются, форматы SGML или XML, для которых DTD или инструменты для обработки не являются общедоступными, а также генерируемый компьютером HTML, Postscript или PDF, который вырабатывается некоторыми текстовыми редакторами исключительно в целях отображения.

«Титульный лист» - для печатной книги собственно титульный лист, а также следующие за ним страницы, которые должны содержать сведения, помещаемые на титульном листе в соответствии с условиями настоящей Лицензии. Для произведений, формат которых не предполагает наличие титульного листа, под Титульным листом понимается текст, который помещен перед началом основного текста произведения, после его названия, напечатанного наиболее заметным шрифтом.

Раздел, «Озаглавленный AAA» означает подраздел Документа, который озаглавлен либо точно AAA, либо содержит AAA в скобках, которые сопровождают текст-перевод AAA на другой язык. (Здесь AAA означает конкретное название подраздела, упомянутое ниже, такое как «Благодарности», «Посвящения», «Одобрения» или «История».) «Сохранять название» такого раздела при модицировании Документа, означает, что он остаётся разделом, «Озаглавленным AAA» в соответствии с этим определением.

Документ может включать Отказ от ответственности после уведомления о том, что данная Лицензия применяется к Документу. Эти Отказы от ответственности как включённые в данную Лицензию посредством ссылки, но только в качестве отказов от ответственности - любые другие значения, которые эти Отказы от ответственности могут иметь - ничтожны и не оказывают влияния на значение данной Лицензии.

8.3 КОПИРОВАНИЕ БЕЗ ВНЕСЕНИЯ ИЗМЕНЕНИЙ

Лицензиат вправе воспроизводить и распространять экземпляры Документа на любом носителе за вознаграждение или безвозмездно при условии, что каждый экземпляр содержит текст настоящей Лицензии, знаки охраны авторских прав, а также уведомление, что экземпляр распространяется в соответствии с настоящей Лицензией, при этом Лицензиат не вправе предусматривать иные лицензионные условия дополнительно к тем, которые закреплены в настоящей Лицензии. Лицензиат не вправе использовать технические средства для воспрепятствования или контроля за чтением или последующим изготовлением копий с экземпляров, распространяемых Лицензиатом. Лицензиат вправе получать вознаграждение за изготовление и распространение экземпляров Документа. При распространении большого количества экземпляров Документа Лицензиат обязан соблюдать условия пункта 3 настоящей Лицензии.

Лицензиат вправе сдавать экземпляры Документа в прокат на условиях, определенных в предыдущем абзаце, или осуществлять публичный показ экземпляров Документа.

8.4 ТИРАЖИРОВАНИЕ

Если Лицензиат издает печатные экземпляры (или экземпляры на носителе, обычно имеющем печатные обложки) Документа в количестве свыше 100, и в соответствии с уведомлением Документа, определяющем лицензионные условия, Документ должен содержать Текст, помещаемый на обложке, Лицензиат обязан издавать экземпляры Документа в обложке с напечатанными на ней ясно и разборчиво соответствующими Текстами, помещаемыми на обложке: Тексты, помещаемые на первой странице обложки — на первой странице, Тексты, помещаемые на последней странице — соответственно на последней. Также на первой и последней странице обложки экземпляра Документа должно быть ясно и разборчиво указано, что Лицензиат является издателем данных экземпляров. На первой странице обложки должно быть указано полное название Документа без пропусков и сокращений, все слова в названии должны быть набраны шрифтом одинакового размера. Лицензиат вправе поместить прочие сведения на обложке экземпляра. Если при издании экземпляров Документа изменяются только сведения, помещенные на обложке экземпляра, за исключением названия Документа, и при этом соблюдаются требования настоящего пункта, такие действия приравниваются к копированию без внесения изменений.

Если объем текста, который должен быть помещен на обложке экземпляра, не позволяет напечатать его разборчиво полностью, Лицензиат обязан поместить разумную часть текста с его начала непосредственно на обложке, а остальной текст на страницах Документа, следующих сразу за обложкой.

Если Лицензиат издает или распространяет Непрозрачные экземпляры Документа в количестве свыше 100, Лицензиат обязан к каждому такому экземпляру приложить Прозрачный экземпляр этого Документа в машиночитаемой форме или указать на каждом Непрозрачном экземпляре Документа адрес в компьютерной сети общего пользования, где содержится полный Прозрачный экземпляр без каких-либо добавленных материалов, полный текст которого каждый пользователь компьютерной сети общего пользования вправе записать в память компьютера с использованием общедоступных сетевых протоколов. Во втором случае Лицензиат обязан предпринять разумные шаги с тем, чтобы доступ к Прозрачному экземпляру Документа по указанному адресу сохранялся по крайней мере в течение одного года после последнего распространения Непрозрачного экземпляра Документа данного тиража, независимо от того, было ли распространение осуществлено Лицензиатом непосредственно или через агентов или розничных продавцов.

Прежде, чем начать распространение большого количества экземпляров Документа, Лицензиату заблаговременно следует связаться с авторами Документа, чтобы они имели возможность предоставить Лицензиату обновленную версию Документа. Лицензиат не обязан выполнять данное условие.

8.5 ВНЕСЕНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ

Лицензиат вправе воспроизводить и распространять Модифицированные версии Документа в соответствии с условиями пунктов 2 и 3 настоящей Лицензии при условии, что Модифицированная версия Документа публикуется в соответствии с настоящей Лицензией. В частности, Лицензиат обязан передать каждому обладателю экземпляра Модифицированной версии Документа права на распространение и внесение изменений в данную Модифицированную версию Документа, аналогично правам на распространение и внесение изменений, которые передаются обладателю экземпляра Документа. При распространении Модифицированных версий Документа Лицензиат обязан:

GNU FDL Modification Conditions

A. поместить на Титульном листе и на обложке при ее наличии название модифицированной версии, отличающееся от названия Документа и названий предыдущих версий. Названия предыдущих версий при их наличии должны быть указаны в Документе в разделе «История». Лицензиат вправе использовать название предыдущей версии Документа с согласия издателя предыдущей версии;
B. указать на Титульном листе в качестве авторов одно или более лиц, ответственных за изменения в Модифицированной версии, а также не менее пяти основных авторов Документа либо всех авторов, если их менее пяти, если только они не освободили Лицензиата от этого требования;
C. указать на Титульном листе наименование издателя Модифицированной версии, с указанием, что он является издателем данной Версии;
D. сохранить все знаки охраны авторского права Документа;
E. поместить соответствующий знак охраны авторского права на внесенные Лицензиатом изменения рядом с прочими знаками охраны авторского права;
F. поместить непосредственно после знаков охраны авторского права уведомление, в соответствии с которым каждому предоставляется право использовать Модифицированную Версию в соответствии с условиями настоящей Лицензии. Текст уведомления приводится в Приложении к настоящей Лицензии;
G. сохранить в уведомлении, указанном в подпункте F, полный список Неизменяемых разделов и Текста, помещаемого на обложке, перечисленных в уведомлении Документа;
H. включить в Модифицированную версию текст настоящий Лицензии без каких-либо изменений;
I. сохранить в Модифицированной версии раздел, Озаглавленный «История», включая его Название, и дополнить его пунктом, в котором указать так же, как данные сведения указаны на Титульном листе, название, год публикации, наименования новых авторов и издателя Модифицированной версии. Если в Документе отсутствует раздел, Озаглавленный «История», Лицензиат обязан создать в Модифицированной версии такой раздел, указать в нем название, год публикации, авторов и издателя Документа так же, как данные сведения указаны на Титульном листе Документа и дополнить этот раздел пунктом, содержание которого описано в предыдущем предложении;
J. сохранить в Модифицированной версии адрес в компьютерной сети, указанный в Документе, по которому каждый вправе осуществить доступ к Прозрачному экземпляру Документа, а также адрес в компьютерной сети, указанный в Документе, по которому можно получить доступ к предыдущим версиям Документа. Адреса, по которым находятся предыдущие версии Документа, можно поместить в раздел «История». Лицензиат вправе не указывать адрес произведения в компьютерной сети, которое было опубликовано не менее чем за четыре года до публикации самого Документа. Лицензиат вправе не указывать адрес определенной версии в компьютерной сети с разрешения первоначального издателя данной версии;
K. сохранить без изменений названия разделов, Озаглавленных «Благодарности» или «Посвящения», а также содержание и стиль каждой благодарности и/или посвящения;
L. сохранить без изменений названия и содержание всех Неизменяемых разделов Документа. Нумерация данных разделов или иной способ их перечисления не включается в состав названий разделов;
M. удалить существующий раздел Документа, Озаглавленный «Одобрения». Такой раздел не может быть включен в Модифицированную версию;
N. не присваивать существующим разделам Модифицированной версии название «Одобрения» или такие названия, которые повторяют название любого из Неизменяемых разделов;
O. сохранить без изменений любые Отказы от ответственности.

Если в Модифицированную версию включены новые предисловия или приложения, которые могут быть определены как Второстепенные разделы и которые не содержат текст, скопированный из Документа, Лицензиат вправе по своему выбору определить все или некоторые из этих разделов как Неизменяемые. Для этого следует добавить их названия в список Неизменяемых разделов в уведомлении в Модифицированной версии, определяющем лицензионные условия. Названия данных разделов должны отличаться от названий всех остальных разделов.

Лицензиат вправе дополнить Модифицированную версию новым разделом, Озаглавленным «Одобрения» при условии, что в него включены исключительно одобрения Модифицированной версии Лицензиата третьими сторонами, например оценки экспертов или указания, что текст Модифицированной версии был одобрен организацией в качестве официального определения стандарта.

Лицензиат вправе дополнительно поместить на обложке Модифицированной версии Текст, помещаемый на обложке, не превышающий пяти слов для первой страницы обложки и 25 слов для последней страницы обложки. К Тексту, помещаемому на обложке, каждым лицом непосредственно или от имени этого лица на основании соглашения с ним может быть добавлено только по одной строке на первой и на последней страницах обложки. Если на обложке Документа Лицензиатом от своего имени или от имени лица, в интересах которого действует Лицензиат, уже был помещен Текст, помещаемый на обложке, Лицензиат не вправе добавить другой Текст. В

этом случае Лицензиат вправе заменить старый текст на новый с разрешения предыдущего издателя, который включил старый текст в издание.

По настоящей Лицензии автор(ы) и издатель(и) Документа не передают право использовать их имена и/или наименования в целях рекламы или заявления или предположения, что любая из Модифицированных Версий получила их одобрение.

8.6 ОБЪЕДИНЕНИЕ ДОКУМЕНТОВ

Лицензиат с соблюдением условий раздела 4 настоящей Лицензии вправе объединить Документ с другими документами, которые опубликованы на условиях настоящей Лицензии, при этом Лицензиат должен включить в произведение, возникшее в результате объединения, все Неизменяемые разделы из всех первоначальных документов без внесения в них изменений, а также указать их в качестве Неизменяемых разделов данного произведения в списке Неизменяемых разделов, который содержится в уведомлении, определяющем лицензионные условия для произведения, и сохранить без изменений все Отказы от ответственности.

Произведение, возникшее в результате объединения, должно содержать только один экземпляр настоящей Лицензии. Повторяющиеся в произведении одинаковые Неизменяемые разделы могут быть заменены единственной копией таких разделов. Если произведение содержит несколько Неизменяемых Разделов с одним и тем же названием, но с разным содержанием, Лицензиат обязан сделать название каждого такого раздела уникальным путем добавления после названия в скобках уникального номера данного раздела или имени первоначального автора или издателя данного раздела, если автор или издатель известны Лицензиату. Лицензиат обязан соответственно изменить названия Неизменяемых разделов в списке Неизменяемых разделов в уведомлении, определяющем лицензионные условия для произведения, возникшего в результате объединения.

В произведении, возникшем в результате объединения, Лицензиат обязан объединить все разделы, Озаглавленные «История» из различных первоначальных Документов в один общий раздел, Озаглавленный «История». Подобным образом Лицензиат обязан объединить все разделы, Озаглавленные «Благодарности» и «Посвящения». Лицензиат обязан исключить из произведения все разделы, Озаглавленные «Одобрения».

8.7 СБОРНИКИ ДОКУМЕНТОВ

Лицензиат вправе издать сборник, состоящий из Документа и других документов, публикуемых в соответствии с условиями настоящей Лицензии. В этом случае Лицензиат вправе заменить все экземпляры настоящей Лицензии в документах одним экземпляром, включенным в сборник, при условии, что остальной текст каждого документа включен в сборник с соблюдением условий по осуществлению копирования без внесения изменений.

Лицензиат вправе выделить какой-либо документ из сборника и издать его отдельно в соответствии с настоящей Лицензией, при условии, что Лицензиатом в данный документ включен текст настоящей Лицензии и им соблюдены условия Лицензии по осуществлению копирования без внесения изменений в отношении данного документа.

8.8 ПОДБОРКА ДОКУМЕНТА И САМОСТОЯТЕЛЬНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ

Размещение Документа или произведений, производных от Документа, с другими самостоятельными документами или произведениями на одном устройстве для хранения или распространения информации или носителе, называется «подборкой», если авторское право, возникающее в результате такой компиляции не используется для ограничения пользователей компиляции сильнее, чем указано в лицензии каждого из отдельных произведений. При включении Документа в «подборку», условия настоящей Лицензии не применяются к самостоятельным произведениям, размещенным вышеуказанным способом вместе с Документом, при условии, что они не являются произведениями, производными от Документа.

Если условия пункта 3 настоящей Лицензии относительно Текста, помещаемого на обложке, могут быть применены к экземплярам Документа в Подборке, то в этом случае Текст с обложки Документа может быть помещен на обложке только собственно Документа внутри подборки при условии, что Документ занимает менее половины объема всей Подборки. Если Документ занимает более четвертой части объема Подборки, в этом случае Текст с обложки Документа должен быть помещен на печатной обложке всей Подборки.

8.9 ПЕРЕВОД

Перевод является одним из способов модификации Документа, в силу чего Лицензиат вправе распространять экземпляры перевода Документа в соответствии с пунктом 4 настоящей Лицензии. Замена Неизменяемых разделов их переводами может быть осуществлена только с разрешения соответствующих правообладателей, однако Лицензиат вправе в дополнение к оригинальным версиям таких Неизменяемых разделов включить в текст экземпляра перевод всех или части таких Разделов. Лицензиат вправе включить в текст экземпляра перевод настоящей Лицензии, всех лицензионных уведомлений, включённых в Документ и всех Отказов от ответственности при условии, что в него включен также и оригинальный текст настоящей Лицензии на английском языке и оригинальные тексты всех уведомлений и отказов. В случае разногласий в толковании текста перевода и оригинального текста Лицензии, уведомлений или отказов, предпочтение отдается оригинальному тексту.

Если в Документе есть разделы, Озаглавленные «Благодарности», «Посвящения» или «История», требования (смотри раздел 4) сохранять без изменения их Названия (смотри раздел 1) часто требует изменения названия Документа.

8.10 РАСТОРЖЕНИЕ ЛИЦЕНЗИИ

Лицензиат вправе воспроизводить, модифицировать, распространять или передавать права на использование Документа только на условиях настоящей Лицензии. Любое воспроизведение, модификация, распространение или передача прав на иных условиях являются недействительными и автоматически ведут к расторжению настоящей Лицензии и прекращению всех прав Лицензиата, предоставленных ему настоящей Лицензией. При этом права третьих лиц, которым Лицензиат в соответствии с настоящей Лицензией передал экземпляры Документа или права на него, сохраняются в силе при условии полного соблюдения ими настоящей Лицензии.

8.11 ПЕРЕСМОТР УСЛОВИЙ ЛИЦЕНЗИИ

Free Software Foundation может публиковать новые исправленные версии GFDL. Такие версии могут быть дополнены различными нормами, регулирующими правоотношения, которые возникли после опубликования предыдущих версий, однако в них будут сохранены основные принципы, закрепленные в настоящей версии (см. https://www.gnu.org/copyleft/).

Каждой версии присваивается свой собственный номер. Если указано, что Документ распространяется в соответствии с определенной версией, то есть указан ее номер, или любой более поздней версией настоящей Лицензии, Лицензиат вправе присоединиться к любой из этих версий Лицензии, опубликованных Free Software Foundation (при условии, что ни одна из версий не является проектом Лицензии). Если Документ не содержит такого указания на номер версии Лицензии, Лицензиат вправе присоединиться к любой из версий Лицензии, опубликованных когда-либо Free Software Foundation (при условии, что ни одна из версий не является Проектом Лицензии).

8.12 ПРИЛОЖЕНИЕ: Порядок применения условий настоящей Лицензии к вашей документации

Чтобы применить условия настоящей Лицензии к созданному вами документу, вам следует включить в документ текст настоящей Лицензии, а также знак охраны авторского права и уведомление, определяющее лицензионные условия, сразу после титульного листа документа в соответствии с нижеприведенным образцом:

> Образец без неизменяемых разделов
>
> (c) имя (наименование) автора или иного правообладателя, год первого опубликования документа Каждый имеет право воспроизводить, распространять и/или вносить изменения в настоящий Документ в соответствии с условиями GNU Free Documentation License, Версии 1.2 или любой более поздней версии, опубликованной Free Software Foundation; данный Документ не содержит Неизменяемых разделов, не содержит Текста, помещаемого на первой странице обложки и не содежит Текста, помещаемого на последней страницы обложки. Копия лицензионного соглашения включена в секцию, озаглавленную «GNU Free Documentation License».

Если документ содержит Неизменяемые разделы, Текст, помещаемый на первой странице обложки либо Текст, помещаемый на последней странице обложки, замените три строки «данный .. обложки.» на нижеследующее:

Образец с неизменяемыми разделами

Данный Документ содержит следующие Неизменяемые разделы (указать названия Неизменяемых разделов); данный документ содержит следующий Текст, помещаемый на первой странице обложки (перечислить),данный документ содержит следующий Текст, помещаемый на последней странице обложки (перечислить).

Если документ содержит Неизменяемые разделы, но не содержит Текстов, помещаемых на обложке, либо какую-нибудь другую комбинацию этих трёх утверждений, скомпонуйте две предложенные альтернативы так, чтобы они подходили к ситуации.

Если ваш документ содержит имеющие существенное значение примеры программного кода, мы рекомендуем вам выпустить их отдельно в соответствии с условиями одной из лицензий на свободное программное обеспечение, например GNU General Public License, чтобы их можно было использовать как свободное программное обеспечение.

Глава 9

Предметный указатель

pygwy, 183
Python, 183

Инструмент "Считать значение", 40
Инструмент Расстояние, 41
Инструмент длины корреляции., 82
Инструмент статистики по строкам/столбцам, 82
Инструмент статистических функций, 76
Канни
    выделение края, 58
Карты кривых сила-расстояние, 151
Комбинации клавиш
    модифицированные, 206
    стандартные, 202
Лапласиан гауссианов, 58
Область инструментов, 14
Обработка данных карт кривых, 149
Окно инструментов, 6
Панель инструментов, 228
Спектр плотности состояний, 135
Уравнение Лапласа, 67
Функция рассеяния точки (PSF), 116
анализ граней, 89, 91
аппроксимация
    3D формы относительно данных XYZ, 147
    3D формы относительно изображения топографии, 89
    кривые сила-расстояние, 134
    отношение между двумя изображениями, 122
    функции, которые можно построить, 134
арифметика над данными, 118
биннинг, 38
браузер данных, 7
вейвлет-преобразование, 106
    дискретное, 106
    непрерывное, 108
взаимная корреляция, 122
взаимное кадрирование двух изображений, 122
встраивание фрагмента, 120
выделение зёрен, 95
    водораздел, 96
    логистическая регрессия, 97
    основанный на поиске границы, 95
    порог, 95
        метод Оцу, 95
    сегментация, 97
выделение края, 58
выпадающие
    глобальные, 68
    местные, 68
выравнивание
    выровнять грани горизонтально, 47
    вычет средней плоскости, 46
    плоской поверхности с выступающими особенностями, 48
    по трём точкам, 47
выравнивание граней, 47
выравнивание зёрен, 103
выравнивание линии, 62
выравнивание плоскости, 46
выравнивание по трём точкам, 47
выравнивание поворотом, 47
выравнивание строк, 60
    вдоль линии, 62
вычет фона, 48
габаритный размер, 135
гауссов фильтр, 55
график функции относительной площади, 81
данные XYZ, 24, 145
    импорт, 35
    совместимость, 25
деконволюция
    двух изображений, 115
длина автокорреляции, 82
    Sal, 83
    Гауссиана, 77
    экспоненциальная, 77
замыкание
    маска, 53
    фильтр, 55
затенение, 57
зонд
    деконволюция, 113
    карта достоверности, 113
    моделирование, 111
    свёртка, 112
извлечение профиля
    вдоль линий скана, 41
    вдоль произвольных линий, 42
    из нескольких изображений, 119
    радиальный, 43
    средняя линия сканирования, 63
изменение масштаба, 38
изменение числа точек, 38
измерение расстояний, 41
измерение решетки, 92
измерение террасы, 93, 137
измерение углов, 41
измерение уклона, 40
измерение шага
    двумерная, 92
измерения амфитеатра, 93, 137

измерения шага
одномерный, 136
инверсия значений, 39
интеграл
кривой графика, 133
области данных, 75
интерполяция, 44
данных под маской, 67
искривление в плоскости xy
аффинное, 69
вдоль пути, 71
перспективы, 70
полиномиальное, 71
исправить разворот, 72
исправление дефектов
линия сканирования, 60
локальные дефекты, 66
кадрирование, 37
карта цвета
выбор умолчаний, 17
редактирование, 17
карты кривых, 24
количество зёрен, 98
компенсация дрейфа, 69
коррекция линий, 60
вдоль линии, 62
коррекция разворота, 72
коррекция царапин, 64
коррекция штрихов, 64
кривизна, 88
логарифмический масштаб, 60
локальное преобразование ранжирования, 60
максимум
зерна, 99
зёрен, 98
кривой графика, 133
на границе зерна, 99
области данных, 75
строки/столбца, 82
фильтр, 55
маска, 18
минимум
зерна, 99
зёрен, 98
кривой графика, 133
на границе зерна, 99
области данных, 75
строки/столбца, 82
фильтр, 55
наклон, 40
расчёт, 40
чтение данных, 40
нейросеть, 123
обучение, 124
применение, 125
обнаружение края пересечением нуля, 58
объединение изображений, 121
объём
зёрен, 98
объёмные данные, 23
перевернуть
вертикально, 149
горизонтально, 149
оба, 149
переворот
вертикально, 37
горизонтально, 37
передаточная функция
оценка, 116
свёртка, 115
переменный последовательный фильтр
замыкание-размыкание, 55
размыкание-замыкание, 55
переназначение
периодических значений, 39
пики, 135
площадь
зёрен, 98
площадь поверхности
области данных, 75
расчёт, 75
поворот
на произвольный угол, 38
на угол, кратный прямому, 37, 149
поиск корреляцией, 123
поиск края, 58
поиск края по кромке среднеквадратичного отклонения, 59
поиск края по локальной нелинейности, 59
полиномиальный фон, 48
презентации, 57
презентация, 18
преобразование Фурье, 103
двумерная фильтрация, 105
одномерная фильтрация, 105
фильтр верхних частот, 105
фильтр нижних частот, 105
преобразование расстояния, 53

размыкание
маска, 53
фильтр, 55
распределение высоты
графики, 133
изображения, 77
распределение диапазонов, 81
распределение наклона (двумерное), 84
распределение углов
графики, 133
изображения
двумерная, 84
одномерная, 77, 84
расчёт длины границы, 101
расчёт объёма, 102
расширение, 37
зонд, 112
маска, 53

фильтр, 55
свёртка
двух изображений, 115
с заданным ядром, 56
соединение изображений, 121
соотношение сторон, 12
пересчёт в квадратные пиксели, 38
спектры, 23
ср. квадр.
выделение края, 59
зерна, 99
зёрен, 98
кривой графика, 133
срединное
зерна, 99
зёрен, 98
кривой графика, 133
области данных, 75
строки/столбца, 82
фильтр, 55
срединный
удаление фона, 49
среднее
зерна, 99
зёрен, 98
кривой графика, 133
области данных, 75
строки/столбца, 82
фильтр, 55
среднеквадратичное (rms)
области данных, 75
строки/столбца, 82
статистика
графики, 133
зёрна, 98
изображения, 74
сшивание изображений, 121
трёхмерное
выбор материала по умолчанию, 22
отображение данных, 20
редактирование материала, 22
угловой спектр, 80
удаление непересекающихся областей, 122
удаление шума
выборочная, 55
гауссов фильтр, 55
фильтр Кувахары, 55
фильтр срединного, 55
фильтр среднего, 55
удаление шума xy, 65
улучшение локального контраста, 59
усечённое среднее
удаление фона, 49
файл, 10–12, 207
фильтр K-того ранга, 50
фильтр Кувахары, 55
фильтр Превитта, 57
фильтр Собела, 57
фильтр выборочной уборки шума, 55
фильтр повышения контраста, 56
фильтр, убирающий шахматную доску, 55
фильтр, убирающий шахматную текстуру, 55
фильтры градиента, 57
фрактальная интерполяция, 68
фрактальная размерность, 109
функционалы Минковского, 80
функция автокорреляции
графики, 133
измерение решетки, 92
изображения
двумерная, 77, 83
одномерная, 77
радиальная, 77
сечение, 83
функция корреляции высота-высота
графики, 133
изображения
одномерная, 78
функция распределения границы, 78
функция спектральной плотности мощности
log-phi, 104
графики, 133
измерение решетки, 92
изображений
радиальная, 80
изображения
двумерная, 84
одномерная, 79
сечение, 84
цвет
наложение, 15
шероховатость
параметры ISO, 86
экспорт текстовых данных
графики, 132
табличные данные, 36
энтропия
распределения значений, 85
распределения уклонов, 85
эрозия
зонд, 113
маска, 53
фильтр, 55